

Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava

Fakulta metalurgie a materiálového inženýrství

Katedra neželezných kovů, rafinace a recyklace

Bakalářská práce

Porovnání numerických metod v modelování ternárních systémů

Comparison of numerical methods at the modelling of ternary systems

2012

Adam Oravský

VŠB - Technická univerzita Ostrava
Fakulta metalurgie a materiálového inženýrství
Katedra neželezných kovů, rafinace a recyklace

Zadání bakalářské práce

Student: **Adam Oravský**
Studijní program: B3923 Materiálové inženýrství
Studijní obor: 3911R029 Neželezné kovy a speciální slitiny
Téma: **Porovnání numerických metod v modelování ternárních systémů**
Comparison of numerical methods at the modelling of ternary systems

Zásady pro vypracování:

Úvod

1. Modelování pomocí aproximace ternárních systémů kvadratickými plochami
2. Modelování pomocí aproximace ternárních systémů b-splajnovými plochami
3. Sestavení výpočetního programu v Matlab
4. Porovnání modelování ternárních systémů kvadratickými plochami a b-splajnovými plochami
5. Diskuse a závěr

Seznam doporučené odborné literatury:

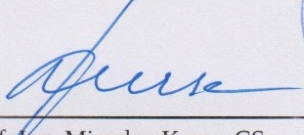
Linkeová, I.: NURBS křivky. Vydavatelství ČVUT v Praze, 2007, 208 s.
Drápala, J. Ternární systémy. E-learning. VŠB – TU Ostrava, 2010, 43 s.
West, D.R.F., Saunders, N. Ternary Phase Diagrams in Material Science, 3rd Edition, MANEY for the Institute of Materials, 2002, 224 p.
Petroov, D.A. Dvojnyje i trojnyje sistemy. Moskva, Metallurgija, 1986, 334 s.
Piegl, L., Tiller, W. The NURBS book. Springer, London, 1997.

Formální náležitosti a rozsah bakalářské práce stanoví pokyny pro vypracování zveřejněné na webových stránkách fakulty.

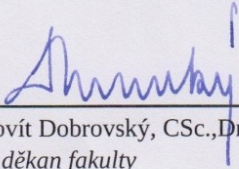
Vedoucí bakalářské práce: **prof. Ing. Jaromír Drápala, CSc.**

Datum zadání: 30.11.2011

Datum odevzdání: 30.04.2012


prof. Ing. Miroslav Kurs, CSc.
vedoucí katedry




prof. Ing. Ludovít Dobrovský, CSc., Dr.h.c.
děkan fakulty

Zásady pro vypracování bakalářské práce

I.

Bakalářskou prací (dále jen BP) se ověřují vědomosti a dovednosti, které student získal během studia, a jeho schopnosti využívat je při řešení teoretických i praktických problémů.

II.

Uspořádání bakalářské práce:

- | | |
|--|------------------------------|
| 1. Titulní list | 5. Obsah BP |
| 2. Zásady pro vypracování BP | 6. Textová část BP |
| 3. Prohlášení + místopřísežné prohlášení | 7. Seznam použité literatury |
| 4. Abstrakt + klíčová slova česky a anglicky | 8. Přílohy |

ad 1) Titulním listem je originál zadání BP, který student obdrží na své oborové katedře.

ad 2) Tyto „Zásady pro vypracování bakalářské práce“ následují za titulním listem.

ad 3) Prohlášení + místopřísežné prohlášení napsané na zvláštním listě (student jej obdrží na své oborové katedře) a vlastnoručně podepsané studentem s uvedením data odevzdání BP. V případě, že BP vychází ze spolupráce s jinými právníckými a fyzickými osobami a obsahuje citlivé údaje, je na zvláštním listě vloženo prohlášení spolupracující právnícké nebo fyzické osoby o souhlasu se zveřejněním BP.

ad 4) Abstrakt a klíčová slova jsou uvedena na zvláštním listě česky a anglicky v rozsahu max. 1 strany pro obě jazykové verze.

ad 5) Obsah BP se uvádí na zvláštním listě. Zahrnuje názvy všech očíslovaných kapitol, podkapitol a statí textové části BP, odkaz na seznam příloh a seznam použité literatury, s uvedením příslušné stránky. Předpokládá se desetinné číslování.

ad 6) Textová část BP obvykle zahrnuje:

- Úvod, obsahující charakteristiku řešeného problému a cíle jeho řešení v souladu se zadáním BP;

- Vlastní rozpracování BP (včetně obrázků, tabulek, výpočtů) s dílčími závěry, vhodně členěné do kapitol a podkapitol podle povahy problému;
- Závěr, obsahující celkové hodnocení výsledků BP z hlediska stanoveného zadání.

BP nemusí obsahovat experimentální (aplikační) část.

BP bude zpracována v rozsahu min. 25 stran (včetně obsahu a seznamu použité literatury). Text musí být napsán vhodným textovým editorem počítače po jedné straně bílého nelesklého papíru formátu A4 při respektování následující **doporučené** úpravy – písmo Times New Roman (nebo podobné) 12b; řádkování 1,5; okraje – horní, dolní – 2,5 cm, levý – 3 cm, pravý 2 cm. Fotografie, schémata, obrázky, tabulky musí být očíslovány a musí na ně být v textu poukázáno. Budou zařazeny průběžně v textu, pouze je-li to nezbytně nutné, jako přílohy (viz ad 8).

Odborná terminologie práce musí odpovídat platným normám. Všechny výpočty musí být přehledně uspořádány tak, aby každý odborník byl schopen přezkoušet jejich správnost. U vzorců, údajů a hodnot převzatých z odborné literatury nebo z praxe musí být uveden jejich pramen - u literatury citován číselným odkazem (v hranatých závorkách) na seznam použité literatury.

Nedostatky ve způsobu vyjadřování, nedostatky gramatické, neopravené chyby v textu mohou snížit klasifikaci práce.

ad 7) BP bude obsahovat alespoň 10 literárních odkazů, z toho nejméně 3 v některém ze světových jazyků.

Seznam použité literatury se píše na zvláštním listě. **Citaci literatury je nutno uvádět důsledně v souladu s ČSN ISO 690.** Na práce uvedené v seznamu použité literatury musí být uveden odkaz v textu BP.

ad 8) Přílohy budou obsahovat jen ty části (speciální výpočty, zdrojové texty programů aj.), které nelze vhodně včlenit do vlastní textové části, např. z důvodu ztráty srozumitelnosti.

III.

Bakalářskou práci student odevzdá ve dvou knihařsky svázaných vyhotoveních, pokud katedra garantující studijní obor neurčí jiný počet. Vnější desky budou označeny takto:

nahoře: *Vysoká škola báňská - Technická univerzita Ostrava*
Fakulta metalurgie a materiálového inženýrství
Katedra

uprostřed: *BAKALÁŘSKÁ PRÁCE*

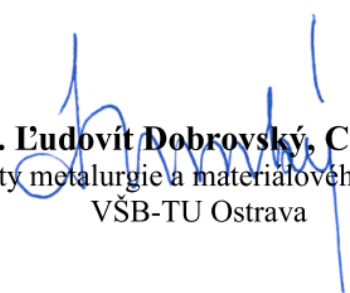
dole: *Rok* *Jméno a příjmení*

Kromě těchto dvou knihařsky svázaných výtisků odevzdá student kompletní práci také v elektronické formě do IS EDISON. Práce vložená v elektronické formě do IS EDISON se musí zcela shodovat s prací odevzdanou v tištěné formě.

IV.

Bakalářská práce, která neodpovídá těmto zásadám, nemůže být přijata k obhajobě. Tyto zásady jsou závazné pro studenty všech studijních programů a forem bakalářského studia fakulty metalurgie a materiálového inženýrství Vysoké školy báňské – Technické univerzity Ostrava od akademického roku 2011/2012.

Ostrava 30. 11. 2011


Prof. Ing. Ludovít Dobrovský, CSc., Dr.h.c.
děkan fakulty metalurgie a materiálového inženýrství
VŠB-TU Ostrava

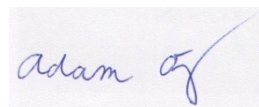
PROHLÁŠENÍ

Prohlašuji, že

- jsem byl seznámen s tím, že na moji bakalářskou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb. – autorský zákon, zejména §35 – užití díla v rámci občanských a náboženských obřadů, v rámci školních představení a užití díla školního (§60 – školní dílo);
- беру на вѣдомі, že Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava (dále jen VŠB – TUO) má právo nevýdělečně ke své vnitřní potřebě bakalářskou práci užít (§35 odst. 3);
- souhlasím s tím, že bakalářská práce bude archivována v elektronické formě v databázi Ústřední knihovny VŠB – TUO a jeden výtisk bude uložen u vedoucího bakalářské práce. Souhlasím s tím, že údaje o bakalářské práci budou zveřejněny v informačním systému VŠB-TUO;
- bylo sjednáno, že s VŠB – TUO, v případě zájmu z její strany, uzavřu licenční smlouvu s oprávněním užít dílo v rozsahu §12 odst. 4 autorského zákona;
- bylo sjednáno, že užít své dílo – bakalářskou práci nebo poskytnout licenci k jejímu využití mohu jen se souhlasem VŠB – TUO, která je oprávněna v takovém případě ode mne požadovat přiměřený příspěvek na úhradu nákladů, které byly VŠB – TUO na vytvoření díla vynaloženy (až do jejich skutečné výše);
- беру на вѣдомі, že odevzdáním své bakalářské práce souhlasím s jejím zveřejněním podle zákona č. 111/1998Sb., o vysokých školách a o změně a doplnění dalších zákonů (Zákon o vysokých školách) bez ohledu na výsledek její obhajoby.

Místopřísežně prohlašuji, že jsem celou bakalářskou práci vypracoval samostatně.

V Ostravě 30. 4. 2012



podpis (Adam Oravský)

Abstrakt

Ternární diagramy se modelují pomocí výpočetní techniky. Tato práce porovnává dva způsoby modelování a popisuje modelování pomocí B-splajnových ploch. Výpočetní program byl zpracován v programu MatLab. Práce rovněž zahrnuje příklady použití programu.

Klíčová slova

Ternární systém; B-splajnová plocha; Modelování likvidu, solidu a solvu; MatLab

Abstract

Ternary diagrams are modeled by computer technology. This study compares two methods of modelling and describes modelling using B-spline surfaces. The calculation program was elaborated in the system MatLab. The study also includes examples of using the program.

Key words

Ternary system; B-spline surface; Modelling of liquidus, solidus and solvus; MatLab

Bibliografická citace

ORAVSKÝ, Adam. *Porovnání numerických metod v modelování ternárních systémů*. Ostrava, 2012. 47 s. Bakalářská práce na Fakultě metalurgie a materiálového inženýrství VŠB – TUO na katedře neželezných kovů, rafinace a recyklace. Vedoucí bakalářské práce prof. Ing. Jaromír Drápala, CSc.

Poděkování

Děkuji prof. Ing. Jaromíru Drápalovi, CSc., za odborné vedení a pomoc s myšlenkovou náplní a také děkuji Mgr. Zuzaně Morávkové, Ph.D., za pomoc s technickou náplní mé bakalářské práce.

Také bych rád poděkoval svojí mamince za dokonalé studijní zázemí.

Obsah

1	Úvod	1
2	Aproximace ternárních systémů kvadratickými plochami	2
2.1	Kvadratická plocha	2
2.2	Výpočetní program	2
2.3	Představení B-splajnů	4
3	Aproximace ternárních systémů B-splajnovými plochami	6
3.1	B-splajnové křivky	6
3.1.1	Stupeň křivky	6
3.1.2	Řídící body	6
3.1.3	Uzlové body	7
3.1.4	Sestrojení B-splajnové křivky	17
3.2	B-splajnové plochy	18
3.2.1	Stupeň plochy	18
3.2.2	Síť řídících bodů	19
3.2.3	Uzlové vektory	20
3.2.4	Sestrojení B-splajnové plochy	22
4	Charakteristiky výpočetního programu	25
4.1	Uživatelské rozhraní	25
4.2	Data	30
5	Porovnání modelování ternárních systémů	33
5.1	Peritektický ternární systém II b	33
5.1.1	Binární diagramy	34
5.1.2	Izotermické řezy a konody	34
5.1.3	Polytermické řezy	37
5.2	Peritektický ternární systém II a	41
5.3	Peritektický ternární systém III	43
6	Diskuse a závěr	45
	Seznam použité literatury	47

1 Úvod

Ternární systém se nejlépe znázorňuje pomocí trojbokého hranolu, kde podstava je tvořena rovnostranným koncentračním trojúhelníkem a svislé stěny jsou tvořeny příslušnými binárními diagramy. Křivky likvidu, solidu a solvu z binárních diagramů se v tomto hranolu rozvíjejí na plochy likvidu, solidu a solvu. Toto znázornění ternárního systému je potřebné zejména ke zjišťování koncentračních změn v průběhu ochlazování a ke stanovení fázových rovnovah. Tyto charakteristiky mají zásadní vliv na finální vlastnosti vyrobené slitiny. V praxi je díky těmto datům možné určit takové složení slitiny, aby měl výsledný materiál potřebné materiálové vlastnosti a zároveň splňoval ekonomické požadavky zadavatele.

Nejlepší možností sledování průběhu ochlazování slitiny s konkrétním složením v prostorovém ternárním diagramu je jeho namodelování pomocí výpočetní techniky. V tomto směru je základní problematikou vhodné zvolení modelovacího postupu, podle kterého se budou plochy likvidu, solidu a solvu modelovat tak, aby byl počítačový model co nejvíc věrný reálné situaci [1].

Cílem bakalářské práce je zhodnocení a porovnání dvou numerických metod modelování ploch likvidu a solidu v ternárních systémech kovových slitin. K jejich realizaci je použit program MatLab. Práce rovněž prezentuje vytvoření programu „*Software pro modelování ternárních systémů slitin*“ (evidenční číslo 007/27-03-2012_SW), který využívá aproximace pomocí B-splajnových ploch. Podstatná část práce zobrazuje výkladovou a programátorskou otázku B-splajnového aparátu. Tato část je provázena mnohými konkrétními příklady pro snadnější pochopení tvorby celého programu. Součástí práce jsou také názorné příklady použití tohoto programu na čtyřech modelových ternárních systémech eutektického a peritektického typu. Výstupy jsou srovnávány s výstupy bakalářské práce Bc. Pavla Pěřšaly [2].

Tato práce vznikla v rámci řešení projektu: MŠM 6198910013 „*Procesy přípravy a vlastnosti vysoce čistých a strukturně definovaných speciálních materiálů*“.

2 Aproximace ternárních systémů kvadratickými plochami

Tato kapitola shrnuje dříve používaný numerický aparát a počítačový program na něm založený. Dále se vyjadřuje k důvodům přechodu k B-splajnovým plochám.

2.1 Kvadratická plocha

Plochy likvidu a solidu v ternárním systému lze popsat polynomem druhého stupně. Předpokládá se, že prvek A tvoří základní matici a prvky B a C jsou příměsi. Vztah pro výpočet plochy pak lze napsat jako (2.1) v případě likvidu a analogicky jako (2.2) v případě solidu.

$$t_L(x_B, x_C) = k_1^L x_B^2 + k_2^L x_C^2 + k_3^L x_B x_C + k_4^L x_B + k_5^L x_C + t_m^A \quad (2.1)$$

$$t_S(x_B, x_C) = k_1^S x_B^2 + k_2^S x_C^2 + k_3^S x_B x_C + k_4^S x_B + k_5^S x_C + t_m^A \quad (2.2)$$

Kde t_L respektive t_S je teplota likvidu nebo solidu, k_1 až k_5 jsou koeficienty regrese a t_m^A je teplota tání prvku A. Koncentrace příměsí B a C jsou vyjádřeny v atomárních procentech.

Z rovnice (2.1) i (2.2) jednoznačně vyplývá, že k sestavení plochy zadané polynomem druhého stupně, tedy kvadratické plochy, je třeba znát právě šest koeficientů. Tyto koeficienty se vypočítávají aproximací experimentálně zjištěných dat metodou nejmenších čtverců [1].

2.2 Výpočetní program

Aproximace ploch likvidu a solidu kvadratickými plochami v ternárních systémech byla naprogramována a byl sestaven výpočetní program, který byl schopen namodelovat ternární systém. Touto problematikou se podrobně zabývá bakalářská práce Bc. Pavla Pěršaly [2]. Program byl opatřen přátelským rozhraním pro snazší komunikaci s uživatelem (obr. 2.1).

vstupdata Ternární systémy A-B-C - Peritektický, typ II b

Jména souboru:

Prvky a jejich teploty tání:

Prvky	T
A	1700
B	500
C	400

Typ systému:
☐ 1 peritektický (eutektický)
☐ 0 ideální
☐ 0 ideální s brázdou

Eutektika a peritektika:
A - B - C:
A: B: C:

Vrchol - A:
Vrchol - B:
Vrchol - C:

Data:

Izotermické grafy:
od T =
do T =
pocet =

Polytermické grafy:
A:
konst. =

Konody:
T =

Koeficienty:
B:
C:
f =

Nápověda:
1. zapište název nového souboru nebo načtete data z již existujícího souboru.
Jméno souboru např. AlCuSi
2. zadejte prvky a jejich teploty tání...OK
3. napište 1 u typu systému
4. zadejte eutektika nebo peritektika...OK
5. zadejte body ploch
Při zadávání ploch jen na "trojúhelníkovou" oblast, nechte
zadávací pole v posledních 2 řádcích prázdné (i bez mezer!)
6. data je potřeba zpracovat ...ZPRACUJ.

Obr. 2.1 Rozhraní výpočetního programu

Tento program nabízel širokou škálu zobrazení a výpočtů, vztahujících se ke konkrétnímu systému. Bylo možno zobrazit jednotlivé binární systémy, izotermické i polytermické řezy a výpočty konod a rovnovážných rozdělovacích koeficientů.

Další charakteristikou programu bylo zadávání jednotlivých ploch (obr. 2.2). K zadání každé plochy potřeboval uživatel znát šest bodů na hranicích plochy.

Likvidus vrchol A				
	B	C	Teplota	% důležitosti
A'	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="1700"/>	<input type="text" value="100"/>
	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="33"/>	<input type="text" value="1100"/>	<input type="text" value="90"/>
p2	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="73"/>	<input type="text" value="500"/>	<input type="text" value="100"/>
	<input type="text" value="20"/>	<input type="text" value="58"/>	<input type="text" value="485"/>	<input type="text" value="100"/>
P	<input type="text" value="38"/>	<input type="text" value="45"/>	<input type="text" value="450"/>	<input type="text" value="100"/>
	<input type="text" value="52"/>	<input type="text" value="26"/>	<input type="text" value="580"/>	<input type="text" value="100"/>
p1	<input type="text" value="71"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="720"/>	<input type="text" value="100"/>
	<input type="text" value="37"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="1200"/>	<input type="text" value="90"/>

Obr. 2.2 Nadefinování plochy

Neopomenutelnou vlastností hraničních bodů ploch, je nutnost jejich shodnosti s body sousedící plochy. Jedině tak je možné vytvořit plynulý přechod v místě eutektické či peritektické brázdy individuálních ploch likvidu, solidu nebo solvu.

2.3 Představení B-splajnů

Vzhledem k tomu, že modelování pomocí aproximace ternárních systémů kvadratickými plochami nebylo schopno zvládnout některé složitější plochy likvidu nebo solidu slitin, vyvstala potřeba použít jiný prostředek modelování.

Základním nedostatkem modelování pomocí aproximace kvadratickými plochami byla možnost využití pouze u ploch s nepřilíš měnícím se charakterem. Toto splňovaly jen nízkolegované slitiny a jednoduché ternární systémy. Kvadratické plochy nebyly schopny přesně vystihnout změny v monotónnosti ani změny mezi konvexností a konkávností. Bylo to způsobeno omezenými možnostmi jejich tvarování, kdy na finální tvar a charakter měly vliv pouze body na hranicích plochy a nezbýval žádný stupeň volnosti pro vytvarování plochy uvnitř koncentračního trojúhelníku.

Jako slepá cesta se ukázaly způsoby modelování pomocí aproximace ploch likvidu a solidu plochami vyšších stupňů, například kubickými plochami. V těchto modelech bylo nadměru obtížné ošetřit chování plochy.

Při modelování ternárních systémů jsou obvykle přesně známy teploty tání prvků a teploty ternárních a binárních eutektik a peritektik. Ovšem informace o charakteru ploch uvnitř koncentračního trojúhelníku jsou nepřesné a v literatuře se liší [3]. Z toho vyplynul požadavek, který byl u mnoha způsobů aproximací nesplnitelný, a sice vlastnost plochy, při které se krajní body interpolují a vnitřní body se aproximují. Jedině tak výsledná plocha body s přesně známou polohou i teplotou prochází a bodům s menší přesností se pouze blíží.

Vhodným řešením v této problematice se ukázaly B-splajnové plochy. Aproximace ploch likvidu a solidu v ternárních systémech pomocí B-splajnových ploch je vhodnějším a mnohdy jediným možným způsobem modelování.

B-splajnová křivka je po částech polynomičká křivka, což znamená, že se nedá popsat celá jedním předpisem, ale každá její část má svůj vlastní konstrukční předpis. Křivka je dokonale hladká, neboť v místech navázání jsou shodné hodnoty nulté, první i druhé derivace funkčního předpisu. Řídící polygon vytváří právě jednu B-splajnovou křivku. Této vlastnosti je využito zejména při styku ploch v místech brázd, kde je nutná jednoznačnost obou krajních křivek.

V současné době nacházejí splajnové křivky široké využití v mnohých odvětvích. Nejmladším a pro potřeby metalurgie nejvyužitelnějším směrem vývoje je jejich použití v počítačové technice. Způsob tvarování křivky pomocí řídicího polygonu dává schopnost měnit tvar finální křivky nebo plochy i uživateli bez hlubší matematické erudice [4].

Základní myšlenku tvorby B-splajnové křivky pěkně a srozumitelně vysvětluje Chaikinův algoritmus [5]:

„Mějme dán v rovině polygon. Každou jeho úsečku rozdělme třemi body na čtyři stejně dlouhé části a pak původní vrcholy ,odřízneme‘ spojnici sousedních bodů dělení. Dostaneme tak nový polygon s otupenými vrcholy a více úsečkami. Na ten znovu použijeme předchozí postup ,ořezávání vrcholů‘. Jaký bude limitní tvar výsledné křivky? Tento rekursivní algoritmus vede ke kvadratickému B-splajnu.“

Obdobný algoritmus je znám i pro kubický B-splajn.

O samotné tvorbě B-splajnových křivek a ploch podrobně pojednává další kapitola.

3 Aproximace ternárních systémů B-splajnovými plochami

Tato kapitola hovoří o B-splajnových křivkách a B-splajnových plochách. Vysvětluje jejich charakteristiky a postup konstrukce.

3.1 B-splajnové křivky

Prostorové B-splajnové plochy se tvoří pomocí B-splajnových křivek. Finální tvar B-splajnové křivky ovlivňují celkem tři tvarovací nástroje. Každá křivka je dána stupněm křivky, řídicími body a uzlovými body [6]. Tyto nástroje jsou dále vysvětleny podrobněji.

3.1.1 Stupeň křivky

Stupeň B-splajnové křivky se označuje p . Pro modelování ploch likvidu a solidu se používají křivky třetího stupně (kubické křivky).

- Příklad:

Konstrukce je ukázána na konkrétním příkladě. Je zvolena křivka třetího stupně.

$$p = 3$$

3.1.2 Řídicí body

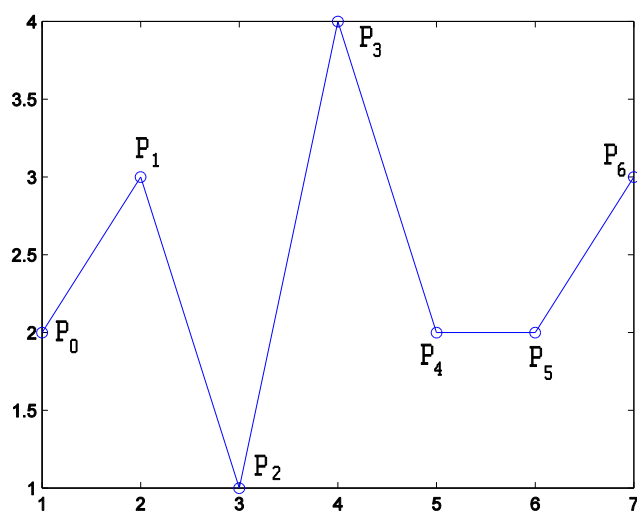
Řídicí body $\mathbf{P}_0, \mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_n$ tvoří dohromady řídicí polygon $(\mathbf{P}_i)_{i=0}^n = (\mathbf{P}_0, \mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_n)$ kde n je počet ramen řídicího polygonu a $\mathbf{P}_i = (x_i, y_i) \in \mathbb{R}^2$. Výsledná B-splajnová křivka řídicí body pouze aproximuje, což znamená, že jimi nemusí procházet. V problematice modelování ploch likvidu a solidu se používají tzv. ukotvené křivky, které krajní řídicí body interpolují, neboli jimi procházejí, a aproximují jen body vnitřní. Veškerý další text se zabývá pouze těmito ukotvenými křivkami. Další důležitou vlastností B-splajnové křivky je její dodržování konvexnosti vůči polygonu.

- Příklad:

Řídící polygon (obr. 3.1) je tvořen sedmi body v rovině (Tab. 3.1).

Tab. 3.1 Souřadnice řídících bodů

	P_0	P_1	P_2	P_3	P_4	P_5	P_6
x	1	2	3	4	5	6	7
y	2	3	1	4	2	2	3



Obr. 3.1 Řídící polygon

Počet ramen řídícího polygonu je šest.

$$n = 6$$

3.1.3 Uzlové body

B-splajnová křivka se konstruuje pomocí báзовých funkcí, které se definují nad uzlovými body. Uzlové body u_0, u_1, \dots, u_m tvoří dohromady uzlový vektor $U = (u_i)_{i=0}^m = (u_0, u_1, \dots, u_m)$ kde m je počet uzlových intervalů. Tento počet se vypočítá podle rovnice (3.1).

$$m = n + 1 + p \quad (3.1)$$

Uzlové body vytvářejí neklesající posloupnost reálných čísel v intervalu $\langle 0,1 \rangle$.

$$U = (u_0, u_1, \dots, u_m), \quad (3.2)$$

kde počet krajních bodů intervalu je $p + 1$. Tyto krajní body se rovnají nule $u_i = 0$ pro $i = 0, \dots, p$ anebo se rovnají jedné $u_i = 1$ pro $i = n + 1, \dots, m$. Rovnice (3.2) pak nabývá tvaru:

$$U = (0, \dots, 0, u_{p+1}, \dots, u_n, 1, \dots, 1). \quad (3.3)$$

Vnitřní body jsou většinou rozděleny rovnoměrným krokem.

- Příklad:

Podle rovnice (3.1) je počet uzlových intervalů deset.

$$m = 10$$

Podle rovnice (3.3) lze pak určit celý uzlový vektor.

Počet krajních bodů („0“ a „1“) je $p + 1 = 3 + 1 = 4$

Rovnoměrný krok pro „0, u_{p+1} , u_{p+2} , u_n , 1“ je jedna čtvrtina.

$$U = (0, 0, 0, 0, 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1, 1, 1, 1)$$

Pro sestavení B-splajnové křivky tedy potřebujeme mít zadán řídicí polygon $(\mathbf{P}_i)_{i=0}^n$, stupeň B-splajnové křivky p a báze funkce $N_{i,p}(u)$ pro $i = 0, \dots, n$, které jsou definované nad uzlovým vektorem U . K sestavení báze funkcí využijeme rekurentní vzorec (3.4) pro $k = 1, \dots, p$.

$$N_{i,k}(u) = \frac{u - u_i}{u_{i+k} - u_i} N_{i,k-1}(u) + \frac{u_{i+k+1} - u}{u_{i+k+1} - u_{i+1}} N_{i+1,k-1}(u) \quad (3.4)$$

a pro $k = 0$ je báze definovaná podle vzorce (3.5).

$$N_{i,0}(u) = \begin{cases} 1, & u \in \langle u_i, u_{i+1} \rangle \\ 0, & u \notin \langle u_i, u_{i+1} \rangle \end{cases} \quad (3.5)$$

K výpočtu potřebných báze funkcí třetího stupně se dostaneme jedině pomocí výpočtů báze funkcí nižších stupňů. Nejdříve nultého, pomocí nich pak prvního atd. [7].

- Příklad:

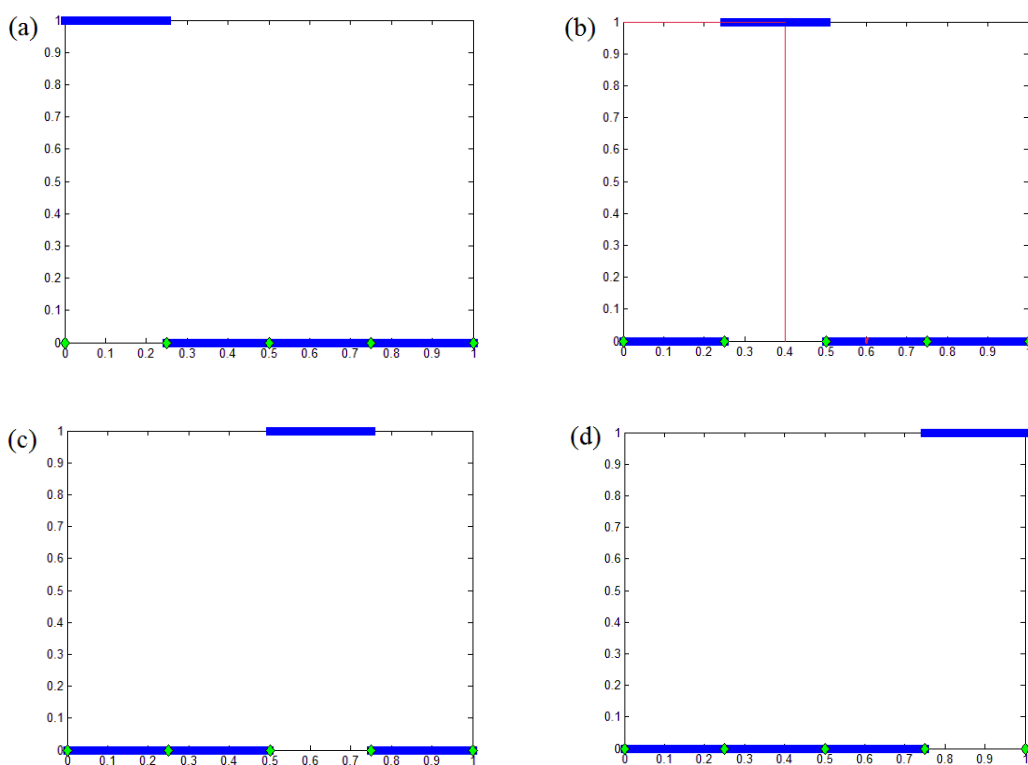
Tvorba bázových funkcí nultého stupně

Na obrázku 3.2 jsou zobrazeny bázové funkce nultého stupně $N_{i,0}$ pro $i = 3, \dots, 6$ a pro uzlový vektor $U = (0, 0, 0, 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1, 1, 1, 1)$. Z obrázků je jasně patrné, že bázové funkce jsou po částech polynomy nultého stupně (po částech konstantní funkce).

Pro větší ilustraci je vypočítána hodnota báze $N_{4,0}(u)$ v bodě $u = 0.4$ (obr. 3.2(b)).

Pro $k = 0$, $i = 4$, $u = 0.4$ z rovnice (3.5) vyplývá:

$$N_{4,0}(0.4) = 1 \text{ protože } 0.4 \in \langle 0.25, 0.5 \rangle$$



Obr. 3.2 Bázové funkce nultého stupně: a) $i=3$, b) $i=4$, c) $i=5$, d) $i=6$

Na obrázku 3.3 je ukázka zdrojového kódu tvorby bazových funkcí nultého stupně v programu MatLab. Je z něj dobře patrna nutnost ošetřit krajní body intervalu proměnných.

```

1 function bazova_krivka=A_base_NO(i,U,u)%U je uzlovy vektor, u je promenna
2 - h=i+1; %neni mozno pouzit "i" jako pocitadlo, protoze i=0..n a
3 %matlab pocita prvky mnozin od 1, tedy u(1), u(2) atd.
4 - if (U(h)==U(h+1))
5 -     bazova_krivka=0; %pokud je interval <0,0> nebo <1,1> tak neobsahuje zadne body
6 - elseif (u==U(h+1))
7 -     bazova_krivka=1; %osetreni posledniho bodu x=1
8 -     elseif and(U(h)<=u,u<U(h+1))
9 -         bazova_krivka=1;
10 -     else
11 -         bazova_krivka=0;
12 - end

```

Obr. 3.3 Zdrojový kód bazových funkcí nultého stupně

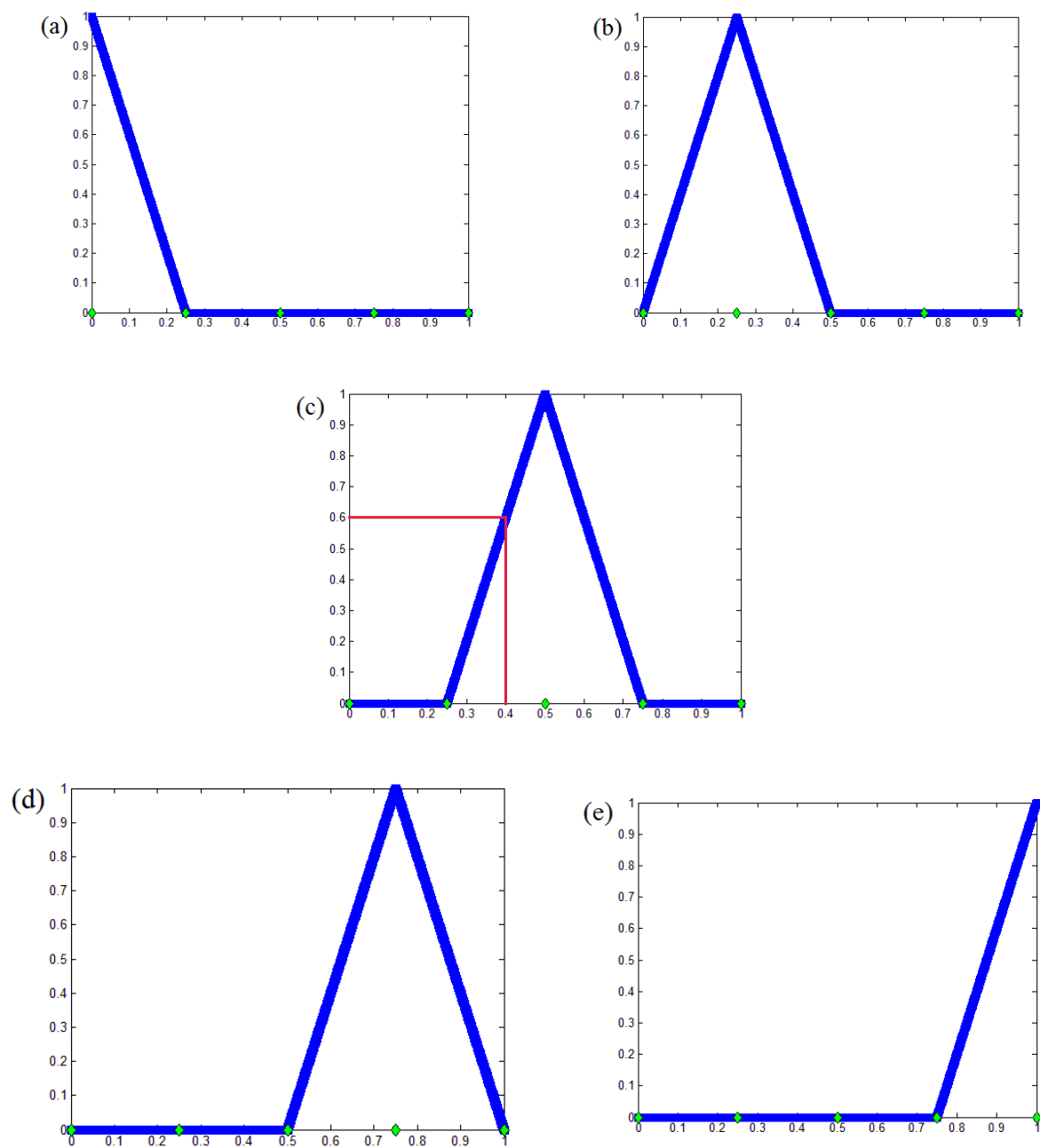
Tvorba bazových funkcí prvního stupně:

Na obrázku 3.4 jsou zobrazeny bazové funkce prvního stupně $N_{i,1}$ pro $i = 2, \dots, 6$ a pro uzlový vektor $U = (0, 0, 0, 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1, 1, 1, 1)$. Z obrázků je jasně patrné, že bazové funkce jsou po částech polynomy prvního stupně (po částech lineární funkce).

Pro větší ilustraci je vypočítána hodnota báze $N_{4,1}(u)$ v bodě $u = 0.4$ (obr. 3.4(c)).

Pro $k = 1$, $i = 4$, $u = 0.4$ z rovnice (3.4) vyplývá:

$$N_{4,1}(0.4) = \frac{0.4 - 0.25}{0.5 - 0.25} * 1 + \frac{0.5 - 0.4}{0.5 - 0.25} * 0 = 0.6$$



Obr. 3.4 Bázové funkce prvního stupně: a) $i=2$, b) $i=3$, c) $i=4$, d) $i=5$, e) $i=6$

Na obrázku 3.5 je ukázka zdrojového kódu tvorby báзовých funkcí prvního stupně v programu MatLab. Je z něj dobře patrna nutnost ošetřit krajní body intervalu proměnných, kde mají některé zlomky ve vzorci (3.4) ve jmenovateli nulu. Tyto zlomky se definitoricky pokládají rovny nule [6]. To se nejlépe provede pomocí podmínek.

```

1 function bazova_krivka=A_base_N1(i,U,u)
2 - k=1;%stupen bazove krivky
3 - h=i+1; %u volani fci nizzich stupnu nemenit i za h, doslo by k duplikaci
4 - if (U(h+k)==0) %podminka zabezpecujici definitoricky vysledek 0/0=0
5 -     bazova_krivka=(U(h+k+1)-u)./(U(h+k+1)-U(h+1)).*(A_base_NO(i+1,U,u));
6 - elseif (U(h+1)==1) %podminka zabezpecujici definitoricky vysledek 0/0=0
7 -     bazova_krivka=(u-U(h))./(U(h+k)-U(h)).*(A_base_NO(i,U,u));
8 - elseif and((u-U(h))./(U(h+k)-U(h)).*(A_base_NO(i,U,u))==0,...
9 -     ((U(h+k+1)-u)./(U(h+k+1)-U(h+1)).*(A_base_NO(i+1,U,u))==0))
10 -     bazova_krivka=0; %aby nasledujici podminka neohrozovala nulove useky
11 - elseif ((u-U(h))./(U(h+k)-U(h)).*(A_base_NO(i,U,u)))==...
12 -     ((U(h+k+1)-u)./(U(h+k+1)-U(h+1)).*(A_base_NO(i+1,U,u)))
13 -     bazova_krivka=1; %aby ve vrcholu nedoslo k 1+1=2
14 - else
15 -     bazova_krivka=(u-U(h))./(U(h+k)-U(h)).*(A_base_NO(i,U,u))+...
16 -     (U(h+k+1)-u)./(U(h+k+1)-U(h+1)).*(A_base_NO(i+1,U,u));
17 - end

```

Obr. 3.5 Zdrojový kód báзовých funkcí prvního stupně

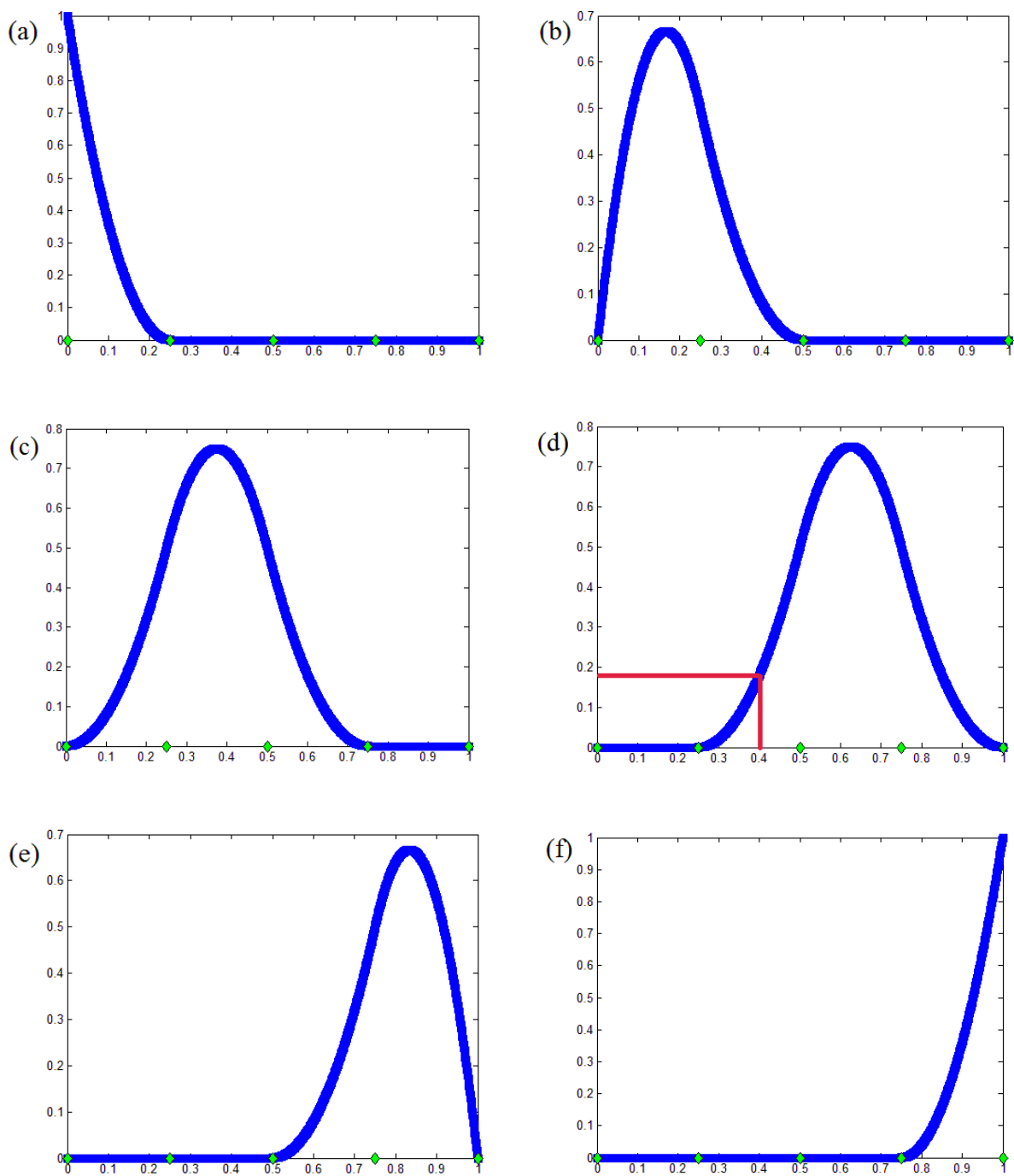
Tvorba báзовých funkcí druhého stupně:

Na obrázku 3.6 jsou zobrazeny báзовые funkce druhého stupně $N_{i,2}$ pro $i = 1, \dots, 6$ a pro uzlový vektor $U = (0, 0, 0, 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1, 1, 1, 1)$. Z obrázků je jasné patrné, že báзовые funkce jsou po částech polynomy druhého stupně (po částech kvadratické funkce).

Pro větší ilustraci je vypočítána hodnota báze $N_{4,2}(u)$ v bodě $u = 0.4$ (obr.3.6(d)).

Pro $k = 2$, $i = 4$, $u = 0.4$ z rovnice (3.4) vyplývá:

$$N_{4,2}(0.4) = \frac{0.4 - 0.25}{0.75 - 0.25} * 0.6 + \frac{1 - 0.4}{1 - 0.5} * 0 = 0.18$$



Obr. 3.6 Bázové funkce druhého stupně: a) $i=1$, b) $i=2$, c) $i=3$, d) $i=4$, e) $i=5$, f) $i=6$

Na obrázku 3.7 je ukázka zdrojového kódu tvorby bazových funkcí druhého stupně v programu MatLab. Byla provedena stejná opatření, jako v předchozím případě.

```

1 function bazova_krivka=A_base_N2(i,U,u)
2 - k=2;%vysvetlivky viz A_base_N1.m
3 - h=i+1;
4 - if (U(h+k)==0)
5 -     bazova_krivka=(U(h+k+1)-u)/(U(h+k+1)-U(h+1)).*(A_base_N1(i+1,U,u));
6 - elseif (U(h+1)==1)
7 -     bazova_krivka=(u-U(h))/(U(h+k)-U(h)).*(A_base_N1(i,U,u));
8 - else
9 -     bazova_krivka=(u-U(h))/(U(h+k)-U(h)).*(A_base_N1(i,U,u))+...
10    (U(h+k+1)-u)/(U(h+k+1)-U(h+1)).*(A_base_N1(i+1,U,u));
11 - end

```

Obr. 3.7 Zdrojový kód bazových funkcí druhého stupně

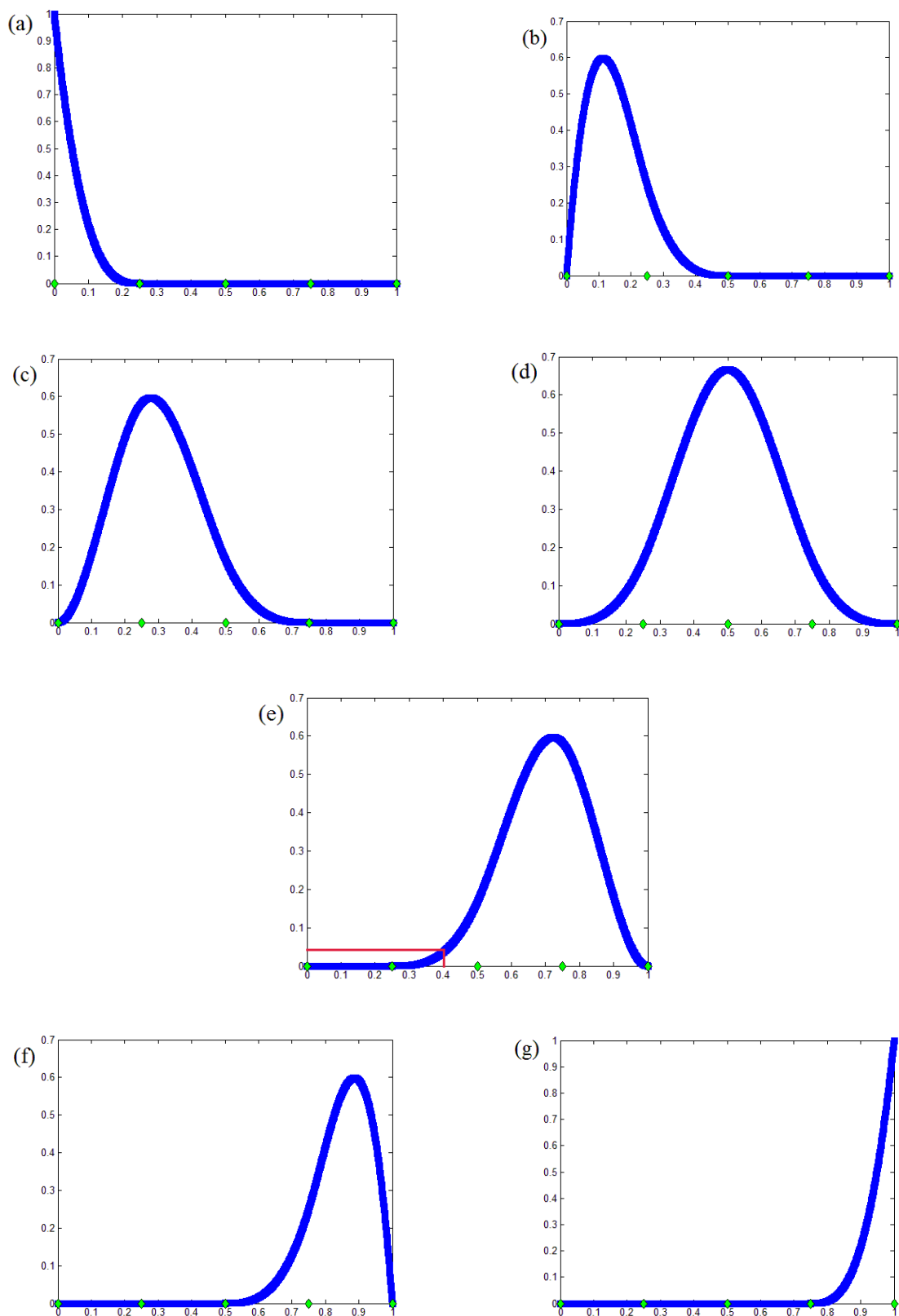
Tvorba bazových funkcí třetího stupně:

Na obrázku 3.8 jsou zobrazeny bazové funkce třetího stupně $N_{i,3}$ pro $i = 0, \dots, 6$ a pro uzlový vektor $U = (0, 0, 0, 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1, 1, 1, 1)$. Z obrázků je jasné patrné, že bazové funkce jsou po částech polynomy třetího stupně (po částech kubické funkce).

Pro větší ilustraci je vypočítána hodnota báze $N_{4,3}(u)$ v bodě $u = 0.4$ (obr. 3.8(e)).

Pro $k = 3$, $i = 4$, $u = 0.4$ z rovnice (3.4) vyplývá:

$$N_{4,3}(0.4) = \frac{0.4 - 0.25}{1 - 0.25} * 0.18 + \frac{1 - 0.4}{1 - 0.5} * 0 = 0.036$$



Obr. 3.8 Bázové funkce třetího stupně: a) $i=0$, b) $i=1$, c) $i=2$, d) $i=3$, e) $i=4$, f) $i=5$, g) $i=6$

Na obrázku 3.9 je ukázka zdrojového kódu tvorby bazových funkcí třetího stupně v programu MatLab. Byla provedena stejná opatření, jako v předchozím případě.

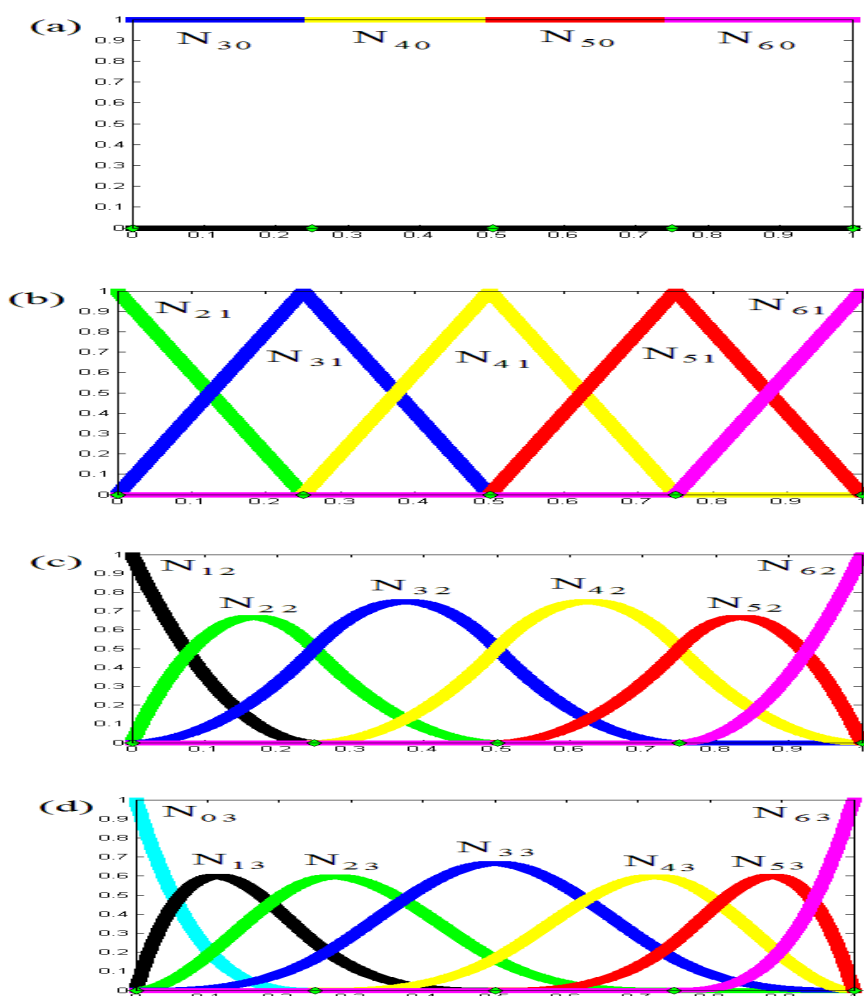
```

1 function bazova_krivka=A_base_N3(i,U,u)
2 - k=3;%vysvetlivky viz A_base_N1.m
3 - h=i+1;
4 - if (U(h+k)==0)
5 -     bazova_krivka=(U(h+k+1)-u) ./ (U(h+k+1)-U(h+1)) .* (A_base_N2(i+1,U,u));
6 - elseif (U(h+1)==1)
7 -     bazova_krivka=(u-U(h)) ./ (U(h+k)-U(h)) .* (A_base_N2(i,U,u));
8 - else
9 -     bazova_krivka=(u-U(h)) ./ (U(h+k)-U(h)) .* (A_base_N2(i,U,u))+...
10    (U(h+k+1)-u) ./ (U(h+k+1)-U(h+1)) .* (A_base_N2(i+1,U,u));
11 - end

```

Obr. 3.9 Zdrojový kód bazových funkcí třetího stupně

Bázové funkce se většinou znázorňují v souhrnném obrázku 3.10.



Obr. 3.10 Souhrnný obrázek bazových funkcí: a) $k=0$, b) $k=1$, c) $k=2$, d) $k=3$

3.1.4 Sestrojení B-splajnové křivky

Když máme sestavené bázové funkce třetího stupně, můžeme sestavit B-splajnovou křivku, která je zadána parametricky podle rovnice (3.6). Je běžné přidávat k B-splajnové křivce i její řídicí polygon [7]. Na obrázku 3.11 je řídicí polygon i s řídicími body nakreslen modře a B-splajnová křivka je nakreslena červeně.

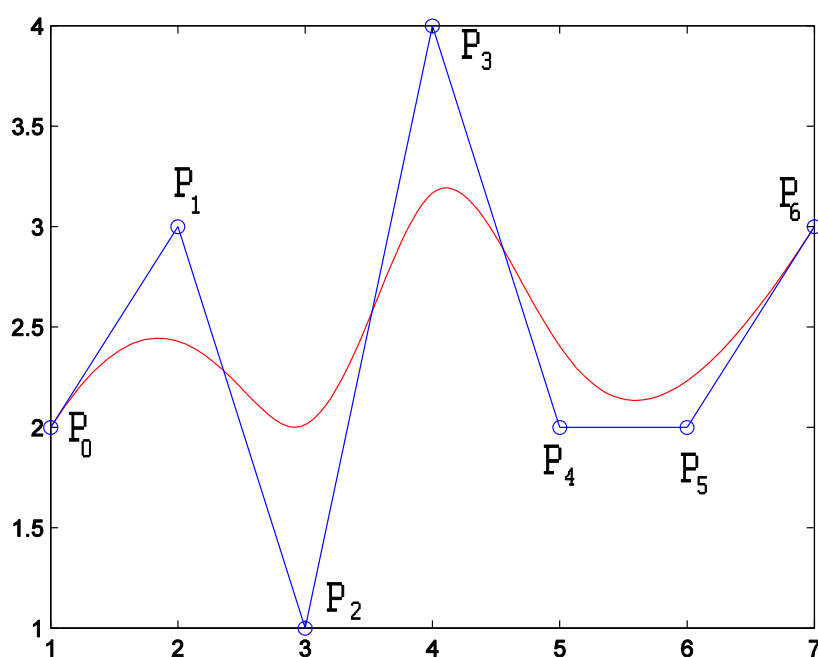
$$S(u) = \sum_{i=0}^n N_{i,p}(u) \mathbf{P}_i \Leftrightarrow \begin{cases} x = \sum_{i=0}^n N_{i,p}(u) x_i \\ y = \sum_{i=0}^n N_{i,p}(u) y_i \end{cases} \quad (3.6)$$

- Příklad:

Sestrojení B-splajnové křivky

Řídicí polygon s řídicími body je vyznačen modře.

B-splajnová křivka je vyznačena červeně.



Obr. 3.11 B-splajnová křivka

Na obrázku 3.12 je nastíněn jeden ze způsobů sestrojení funkce zadané parametricky.

```

1 - P=[1 2 3 4 5 6 7;
2 -     2 3 1 4 2 2 3];%řidící polygon
3 - U=[0 0 0 0 0.25 0.5 0.75 1 1 1 1];%uzlový vektor
4 - u=0:0.01:1;%u=proměnná
5 - n=6;pomx=0;pomy=0;
6 - for j=1:length(u);%vynulování souřadnic (x,y)
7 -     x(j)=0;
8 -     y(j)=0;
9 - end;
10 %sestavení parametrických rovnic
11 for j=1:length(u);
12     for i=0:n;
13         pomx=(A_base_N3(i,U,u(j)).*P(1,i+1));
14         x(j)=x(j)+pomx;
15     end;
16 end;
17 for j=1:length(u);
18     for i=0:n;
19         pomy=(A_base_N3(i,U,u(j)).*P(2,i+1));
20         y(j)=y(j)+pomy;
21     end;
22 end;
23 %vykreslení B-krivky i řidícího polygonu
24 hold on;box on;plot(x,y,'r');plot(P(2,:),'-o');

```

Obr. 3.12 Sestrojení B-splajnové křivky

3.2 B-splajnové plochy

B-splajnové plochy jsou rozšířením B-splajnových křivek z 2D do 3D prostoru. Obdobně jako u křivek lze říct, že finální tvar plochy ovlivňují tři tvarovací nástroje, které jsou samozřejmě přizpůsobené třetímu rozměru. Jsou to stupeň plochy, síť řídících bodů a uzlové vektory [8]. Tyto nástroje jsou dále vysvětleny podrobněji.

3.2.1 Stupeň plochy

Při aproximacích likvidu nebo solidu pomocí B-splajnové plochy se nejčastěji vychází z básových funkcí třetího stupně, a proto i pro vzniklou plochu platí $p = 3$, jedná se tedy o kubickou plochu.

- Příklad:

Konstrukce je ukázána na konkrétním příkladě. Je zvolena plocha třetího stupně.

$$p = 3$$

3.2.2 Sít' řídicích bodů

Řídicí body tvoří dvourozměrnou sít' řídicích bodů $\mathbf{P}_{ij} = (x_{ij}, y_{ij}, z_{ij}) \in \mathbb{R}^3$ kde $i = 0, \dots, n$ a $j = 0, \dots, m$. Tato sít' nemusí být nutně čtvercová.

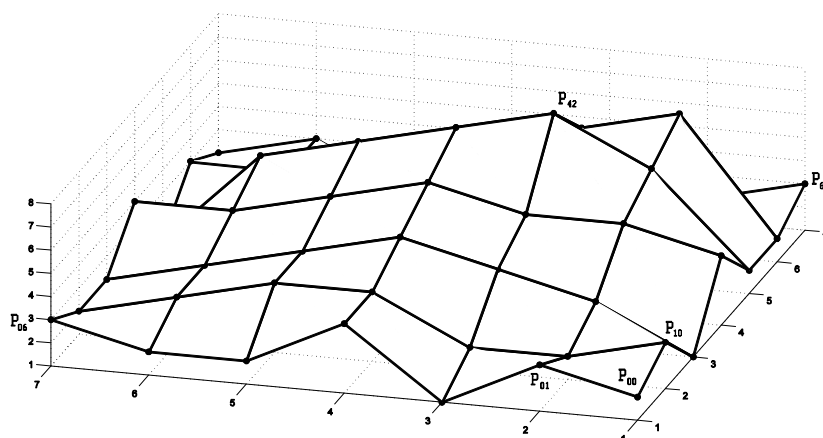
- Příklad:

Sít' řídicích bodů je tvořena sedmi body ve směru osy x a sedmi body ve směru osy y .

To vytváří celkem 49 bodů v prostoru (Tab. 3.2) a obrázek 3.13.

Tab. 3.2 Souřadnice řídicích bodů

\mathbf{P}_{00} až \mathbf{P}_{06}			\mathbf{P}_{10} až \mathbf{P}_{16}			\mathbf{P}_{20} až \mathbf{P}_{26}			\mathbf{P}_{30} až \mathbf{P}_{36}			\mathbf{P}_{40} až \mathbf{P}_{46}			\mathbf{P}_{50} až \mathbf{P}_{56}			\mathbf{P}_{60} až \mathbf{P}_{66}		
1	1	2	2	1	3	3	1	1	4	1	4	5	1	2	6	1	2	7	1	3
1	2	3	2	2	2	3	2	3	4	2	5	5	2	6	6	2	7	7	2	2
1	3	1	2	3	2	3	3	4	4	3	5	5	3	8	6	3	6	7	3	2
1	4	4	2	4	4	3	4	5	4	4	6	5	4	7	6	4	5	7	4	4
1	5	2	2	5	4	3	5	4	4	5	5	5	5	6	6	5	3	7	5	1
1	6	2	2	6	3	3	6	3	4	6	4	5	6	5	6	6	3	7	6	3
1	7	3	2	7	2	3	7	2	4	7	4	5	7	1	6	7	3	7	7	2



Obr. 3.13 Sít' řídicích bodů

Počet ramen polygonu v obou směrech je šest.

$$n = 6, m = 6$$

3.2.3 Uzlové vektory

B-splajnová plocha se sestavuje na základě 3D bázových funkcí, vzniklých součinem dvou 2D bázových funkcí. Každá z těchto funkcí je definovaná nad vlastním uzlovým vektorem.

Uzlové body u_0, u_1, \dots, u_r ve směru osy x tvoří dohromady uzlový vektor $U = (u_i)_{i=0}^r = (u_0, u_1, \dots, u_r)$ a uzlové body v_0, v_1, \dots, v_s ve směru osy y tvoří dohromady uzlový vektor $V = (v_i)_{i=0}^s = (v_0, v_1, \dots, v_s)$. Počty uzlových intervalů se vypočítají podle rovnice (3.7) respektive (3.8), které jsou analogické s (3.1).

$$r = n + 1 + p \quad (3.7)$$

$$s = m + 1 + p \quad (3.8)$$

Obě dvě sady uzlových bodů pak vytvářejí neklesající posloupnosti (3.9) respektive (3.10) reálných čísel v intervalu $\langle 0,1 \rangle$.

$$U = (0, \dots, 0, u_{p+1}, \dots, u_n, 1, \dots, 1) \quad (3.9)$$

$$V = (0, \dots, 0, v_{p+1}, \dots, v_m, 1, \dots, 1) \quad (3.10)$$

Kde $u_i = 0$ pro $i = 0, \dots, p$ a $u_i = 1$ pro $i = n + 1, \dots, r$ respektive kde $v_j = 0$ pro $j = 0, \dots, p$ a $v_j = 1$ pro $j = m + 1, \dots, s$.

- Příklad:

Podle (3.7) respektive (3.8) je počet uzlových intervalů v obou směrech deset.

$$r = 10, s = 10$$

Podle (3.9)

$$\text{Počet „0“ a „1“ je } p + 1 = 3 + 1 = 4$$

Rovnoměrný krok pro „0, $u_{p+1}, u_{p+2}, u_n, 1$ “ je čtvrtina.

$$U = (0, 0, 0, 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1, 1, 1, 1)$$

Podle (3.10)

Počet „0“ a „1“ je $p + 1 = 3 + 1 = 4$

Rovnoměrný krok pro „0, $v_{p+1}, v_{p+2}, v_m, 1$ “ je čtvrtina.

$V = (0, 0, 0, 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1, 1, 1, 1)$

Pro sestrojení B-splajnové plochy pak nabývají bázové funkce tvaru, který lze symbolicky zapsat:

$$\text{Bázová funkce v prostoru} = N_{i,p}(u) * N_{j,p}(v) \quad (3.11)$$

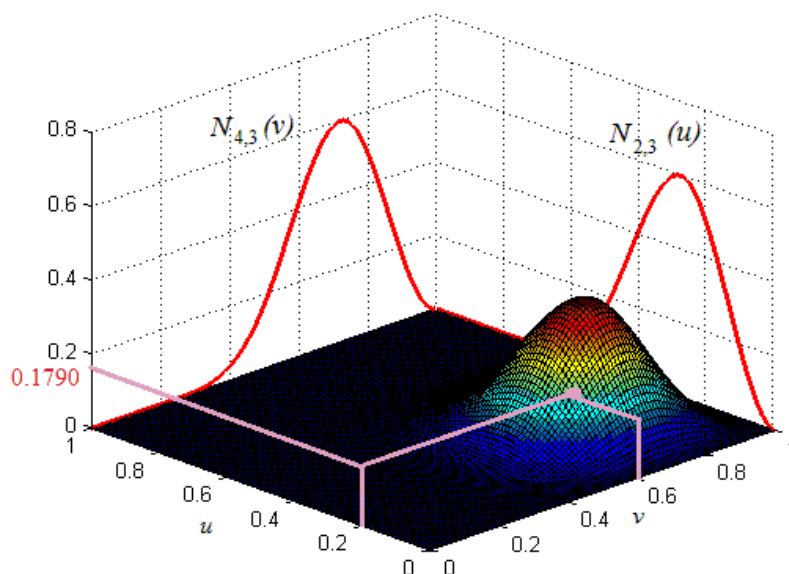
- Příklad:

Na obrázku 3.14 je barevně zobrazena bázová funkce třetího stupně $N_{2,3}(u)N_{4,3}(v)$ pro uzlové vektory $U = (0, 0, 0, 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1, 1, 1, 1)$ a $V = (0, 0, 0, 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1, 1, 1, 1)$. Z obrázků je jasné patrné, že bázová funkce vznikla spojením báze $N_{2,3}(u)$ a báze $N_{4,3}(v)$ (na obrázku červenou barvou).

Pro větší ilustraci je vypočítána hodnota báze $N_{2,3}(u)N_{4,3}(v)$ v bodě $u = 0.2$ a $v = 0.6$ (obr. 3.14 (růžová barva)).

Pro $p = 3, i = 2, j = 4$ a proměnné $u = 0.2$ a $v = 0.6$ platí podle rovnice (3.11):

$$N_{2,3}(0.2) * N_{4,3}(0.6) = 0.4640 * 0.3843 = 0.1790$$



Obr. 3.14 Bázová funkce $N_{2,3}(u)N_{4,3}(v)$

Stejným způsobem by bylo možné zobrazit všechny báze funkce. V tomto příkladě by jich celkem bylo 49.

Na obrázku 3.15 je ukázka zdrojového kódu pro vygenerování a zobrazení báze funkce

```

1 - U=[0 0 0 0 0.25 0.5 0.75 1 1 1 1];%uzlovy vektor U (a)
2 - V=[0 0 0 0 0.25 0.5 0.75 1 1 1 1];%uzlovy vektor V
3 - u=0:0.01:1;v=0:0.01:1;%promenne
4 - n=6;
5 - [X,Y] = meshgrid(u,v);%vygenerovani site
6 - iu=3;iv=3;%poloha baze <0:6>
7 - for ju=1:length(u);%vygenerovani baze
8 -     for jv=1:length(v);
9 -         Z(ju,jv)=A_baseE3(U,V,u(ju),v(jv),iu,iv);
10 -     end;
11 - end;
12 - %vykresleni baze
13 - surf(X,Y,Z)

```

```

1 - function bazova_plocha=A_baseE3(U,V,u,v,iu,iv) (b)
2 - bazova_plocha=A_base_N3(iu,U,u).*A_base_N3(iv,V,v);
3 - end
4 -

```

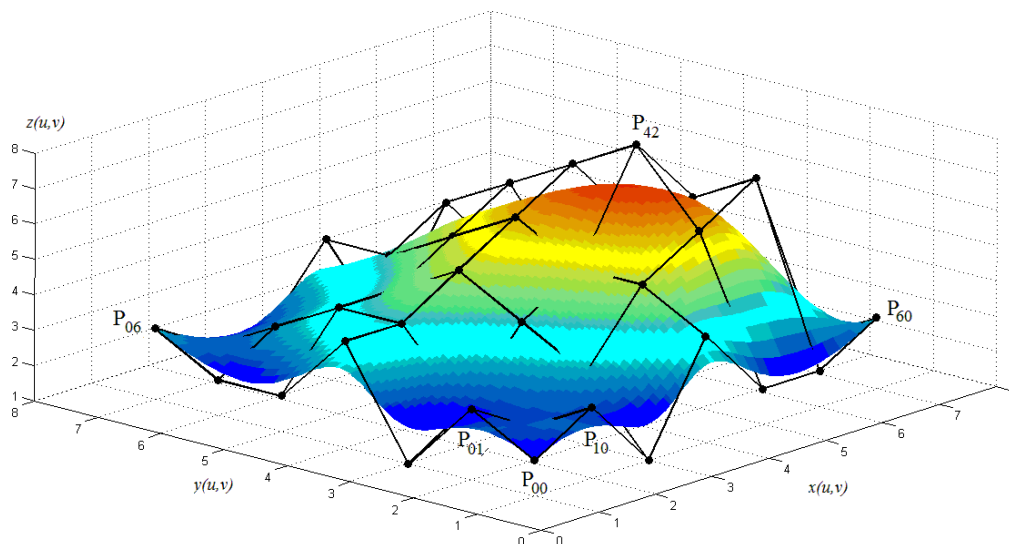
Obr. 3.15 Zdrojový kód: a) zobrazení báze funkce, b) vygenerování báze funkce

3.2.4 Sestrojení B-splajnové plochy

Báze funkce a síť řídicích bodů dohromady vytváří B-splajnovou plochu, která je zadána parametricky podle rovnice (3.12). K B-splajnové ploše lze přidat i síť jejích řídicích bodů. Na obrázku 3.16 je síť řídicích bodů nakreslena černě a B-splajnová plocha je nakreslena barevně [9].

$$S(u, v) = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m N_{i,p}(u) N_{j,p}(v) \mathbf{P}_{ij} \Leftrightarrow \begin{cases} x = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m N_{i,p}(u) N_{j,p}(v) x_{ij} \\ y = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m N_{i,p}(u) N_{j,p}(v) y_{ij} \\ z = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m N_{i,p}(u) N_{j,p}(v) z_{ij} \end{cases} \quad (3.12)$$

- Příklad:
Sestrojení B-splajnové plochy
Síť řídicích bodů je vyznačena černě.
B-splajnová plocha je vyznačena barevně.



Obr. 3.16 B-splajnová plocha

Jeden ze způsobů sestrojení B-splajnové plochy, zadané parametricky, v programu MatLab je na obrázku 3.17.


```

1 %Zadani ridicich bodu
2 - U=[0 0 0 0 0.25 0.5 0.75 1 1 1 1];%uzlovy vektor U
3 - V=[0 0 0 0 0.25 0.5 0.75 1 1 1 1];%uzlovy vektor V
4 - u=0:0.01:1;v=0:0.01:1;%promenne
5 - n=6;
6 - for j=0:n;for i=0:n;P1(i+1,j+1)=i+1;end;end;
7 - for j=0:n;for i=0:n;P2(i+1,j+1)=j+1;end;end;
8 - P3=[2 3 1 4 2 2 3;
9       3 2 2 4 4 3 2;
10      1 3 4 5 4 3 2;
11      4 5 5 6 5 4 4;
12      2 6 8 7 6 5 1;
13      2 7 6 5 3 3 3;
14      3 2 2 4 1 3 2];
15 %vynulovani a nadeфинovani souradnic
16 - x=zeros(length(u),length(v));
17 - y=zeros(length(u),length(v));
18 - z=zeros(length(u),length(v));
19 - pomx=0;pomy=0;pomz=0;
20 %parametrické rovnice
21 - for ju=1:length(u);
22 -     for jv=1:length(v);
23 -         for iu=0:n;
24 -             for iv=0:n;
25 -                 pomx=A_bazeE3(U,V,u(ju),v(jv),iu,iv).*P1(iu+1,iv+1);
26 -                 x(ju,jv)=x(ju,jv)+pomx;
27 -             end;
28 -         end;
29 -     end;
30 - end;
31 - for ju=1:length(u);
32 -     for jv=1:length(v);
33 -         for iu=0:n;
34 -             for iv=0:n;
35 -                 pomy=A_bazeE3(U,V,u(ju),v(jv),iu,iv).*P2(iu+1,iv+1);
36 -                 y(ju,jv)=y(ju,jv)+pomy;
37 -             end;
38 -         end;
39 -     end;
40 - end;
41 - for ju=1:length(u);
42 -     for jv=1:length(v);
43 -         for iu=0:n;
44 -             for iv=0:n;
45 -                 pomz=A_bazeE3(U,V,u(ju),v(jv),iu,iv).*P3(iu+1,iv+1);
46 -                 z(ju,jv)=z(ju,jv)+pomz;
47 -             end;
48 -         end;
49 -     end;
50 - end;
51 %vykresleni B-plochy i se siti ridicich bodu
52 - hold on;box off;grid on;surf(x,y,z,'EdgeColor','none');
53 - mesh(P1,P2,P3,'EdgeColor','k','LineWidth',2);
54 - plot3(P1,P2,P3,'ko','MarkerFaceColor','k','MarkerSize',6);
55 - hidden off;

```

Obr. 3.17 Sestrojení B-splajnové plochy

4 Charakteristiky výpočetního programu

V této kapitole je představen výpočetní program pro modelování ploch v ternárních systémech, využívající B-splajnové plochy.

4.1 Uživatelské rozhraní

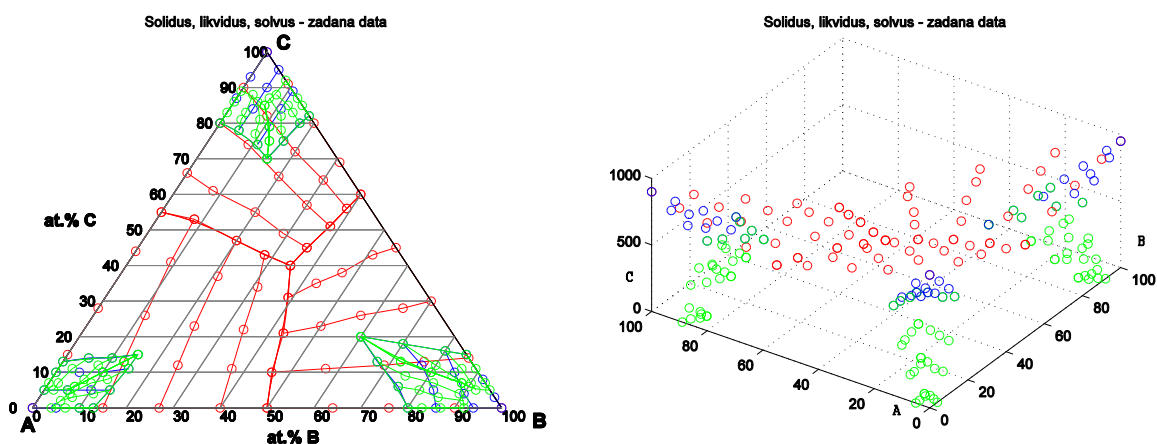
Výpočetní program je vybaven přátelským grafickým rozhraním v českém jazyce. Toto rozhraní je velmi intuitivní a na běžného uživatele neklade žádné vyšší nároky na pochopení. Uživatelské rozhraní lze rozdělit na devět oblastí (obr. 4.1). Každá oblast je popsána dále. Program je předváděn na konkrétním příkladu eutektického ternárního systému A-B-C typ I (tab. 4.1) [1].

Tab. 4.1 Základní údaje systému A-B-C (typ I)

Typ	I	Poloha	
Teplota tání prvku A	1000°C	0% B	0% C
Teplota tání prvku B	950°C	100% B	0% C
Teplota tání prvku C	900°C	0% B	100% C
Binární eutektikum A-B	700°C	50% B	0% C
Binární eutektikum A-C	675°C	0% B	55% C
Binární eutektikum B-C	650°C	40% B	60% C
Ternární eutektikum	600°C	35% B	40% C

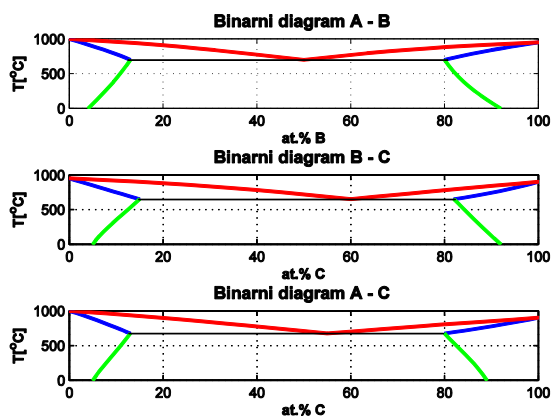
Obr. 4.1 Uživatelské rozhraní

1. *Vstupní soubory* – V této oblasti se nacházejí tři vyplňovací pole, do kterých se zadávají jména souborů s daty ploch likvidu, solidu a solvu. Tyto soubory se zadávají bez přípony. O tvorbě těchto souborů hovoří kapitola 4.2.
2. *Znáznornění vstupních dat* – Tato funkce slouží ke kontrole vstupních dat. Po jejím použití se vygenerují dvě okna. V jednom je systém zobrazen plošně v koncentračním trojúhelníku (obr. 4.2a) a ve druhém je systém zobrazen prostorově axonometricky (obr. 4.2b). Prostorové zobrazení se dá libovolně natáčet. Tímto způsobem lze přijít na případné chyby v zadávání. Generování je ukončeno po zobrazení okna „*Výpočet ukončen*“.



Obr. 4.2 Zadaná data

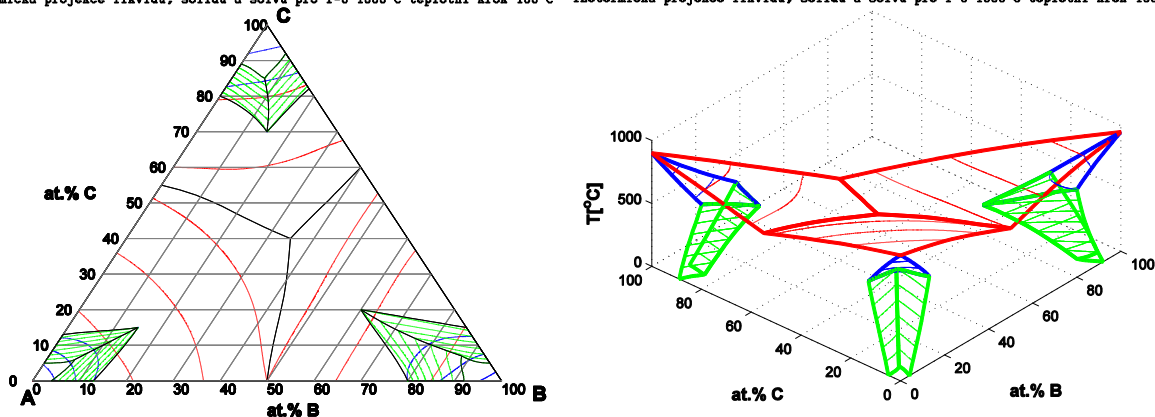
3. *Binární diagramy* – Tato funkce zobrazí příslušné tři binární diagramy (obr. 4.3).



Obr. 4.3 Binární diagramy

4. *Izotermie* – V této oblasti se nachází jedno vyplňovací pole, do kterého je nutno napsat teplotní krok ve °C, ve kterém se budou generovat izotermie. Tyto izotermie se budou generovat od nejnižší teploty v systému po nejvyšší teplotu v systému. Výstupem funkce jsou dvě okna, ve kterých jsou izotermie vykresleny plošně (obr. 4.4a) a prostorově (obr. 4.4b).

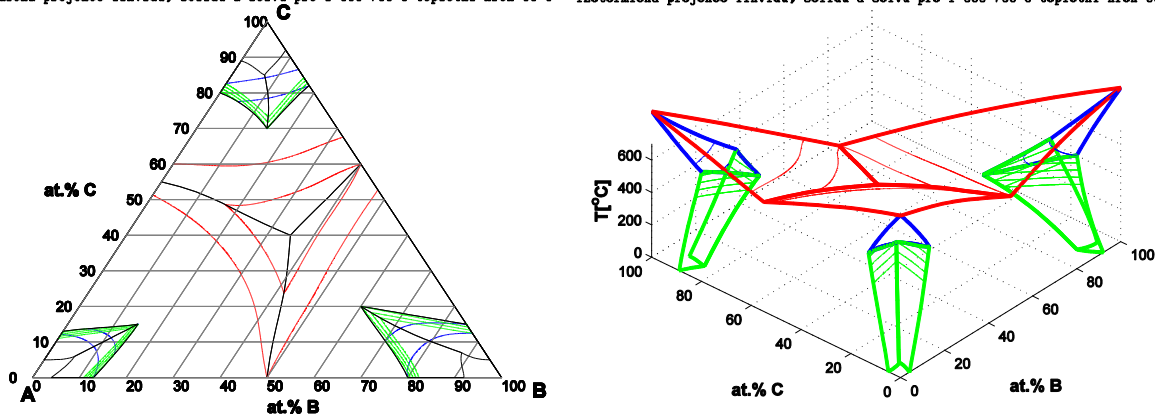
Izotermická projekce likvidu, solidu a solvu pro $T=0-1000^{\circ}\text{C}$ teplotní krok 100°C Izotermická projekce likvidu, solidu a solvu pro $T=0-1000^{\circ}\text{C}$ teplotní krok 100°C



Obr. 4.4 Izotermická projekce v celém rozsahu

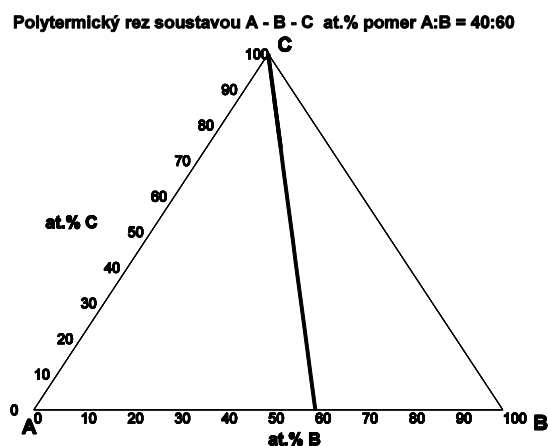
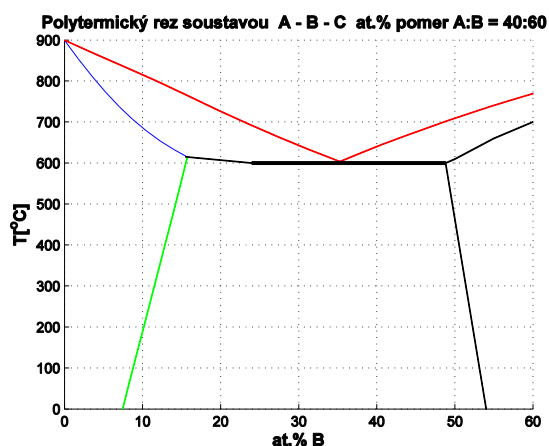
5. *Izotermie – teplotní rozsah* – V této oblasti se nachází tři vyplňovací pole, do kterých je nutno napsat teplotní rozmezí ve $^{\circ}\text{C}$, ve kterém se mají generovat izotermie a teplotní krok ve $^{\circ}\text{C}$. Tyto izotermie se budou generovat od nejnižší zadané teploty po nejvyšší zadanou teplotu. Výstupem funkce jsou dva obrázky, ve kterých jsou izotermie vykresleny plošně (obr. 4.5a) a prostorově (obr. 4.5b).

Izotermická projekce likvidu, solidu a solvu pro $T=500-700^{\circ}\text{C}$ teplotní krok 50°C Izotermická projekce likvidu, solidu a solvu pro $T=500-700^{\circ}\text{C}$ teplotní krok 50°C



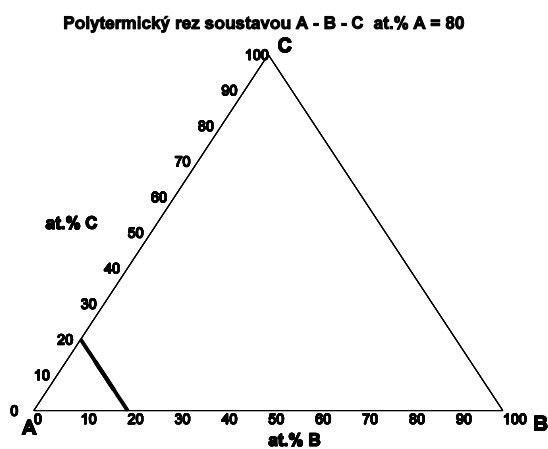
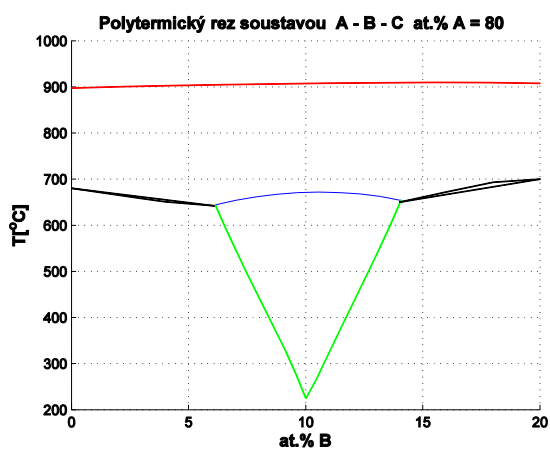
Obr. 4.5 Izotermická projekce v zadaném rozmezí

6. *Polytermické řezy, poměr = konst.* – Tato funkce umožňuje vykreslení polytermického (svislého) řezu, který prochází jedním vrcholem koncentračního trojúhelníku a poměr zbylých dvou složek se nemění. Vytvoří se dvě okna, kde v jednom je polytermický řez (obr. 4.6a) a ve druhém je jeho umístění v koncentračním trojúhelníku (obr. 4.6b).



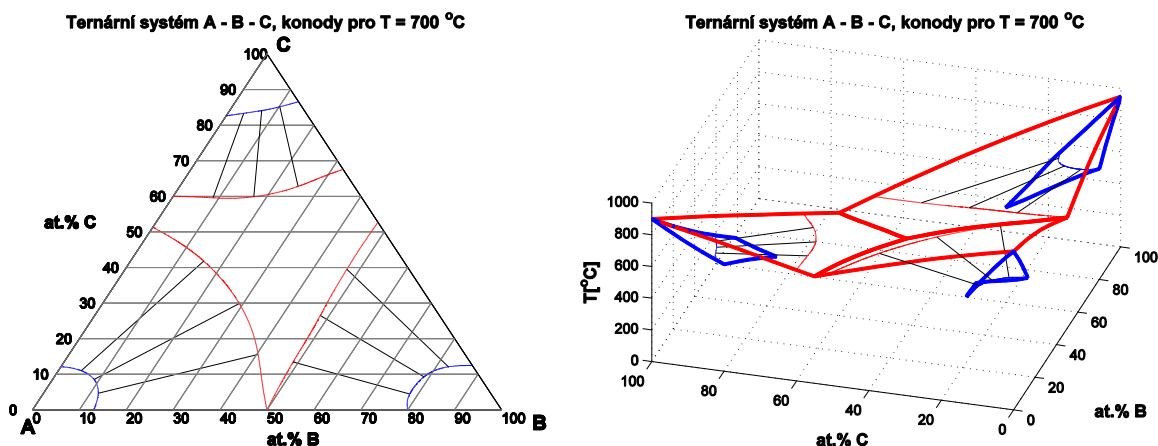
Obr. 4.6 Polytermický řez, poměr = konst.

7. *Polytermické řezy, at. % prvku = konst.* – Tato funkce umožňuje vykreslení polytermického řezu, který je rovnoběžný s jednou stranou koncentračního trojúhelníku a koncentrace protější složky se nemění. Vytvoří se dvě okna, kde v jednom je polytermický řez (obr. 4.7a) a ve druhém je jeho umístění v koncentračním trojúhelníku (obr. 4.7b).



Obr. 4.7 Polytermický řez, at. % prvku = konst.

8. *Konody* – Tato oblast obsahuje vyplňovací pole, do kterého se zadá teplota izotermického řezu, a rozbalovací nabídku, která určuje počet konod. Funkce vygeneruje dva obrázky zobrazující konody a příslušné izotermy (obr. 4.8).



Obr. 4.8 Konody a) plošně zobrazené, b) prostorově zobrazené

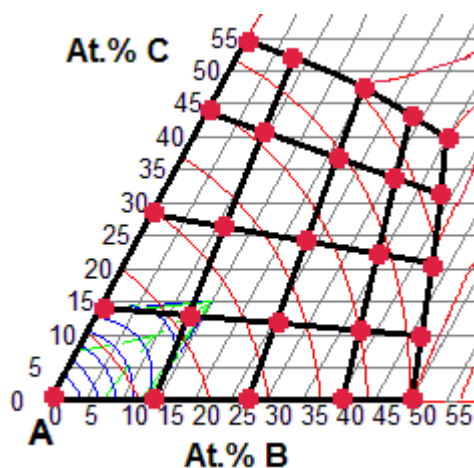
9. *Rovnovážné rozdělovací koeficienty* – Oblast obsahuje zadávací políčka, pomocí nichž program zjistí, které koeficienty má počítat. Vypočítané rovnovážné rozdělovací koeficienty se vypíší do okna programu textového souboru.

V záhlaví rozhraní se dále nacházejí další tlačítka:

1. *Data* – Tuto funkci popisuje kapitola 4.2.
2. *Zavři okna* – Zavře všechna vygenerovaná okna.
3. *Nápověda* – Zobrazí okno s několika radami autora programu. Předpokládá se, že se tyto rady budou ještě rozšiřovat podle námětů a požadavků uživatelů.
4. *O programu* – Zobrazí okno se základními údaji o programu.

4.2 Data

Největší rozdíl pro uživatele mezi tímto programem, založeným na B-splajnových plochách, a předchozím programem, založeným na kvadratických plochách, je zadávání dat. Ve starším programu se zadávaly body na hranicích ploch (viz kapitola 2.2). V tomto programu se plocha proloží vhodnými úsečkami ve dvou směrech a zadají se body ležící na průsečících těchto úseček (obr. 4.9). Minimální počet úseček v obou směrech je čtyři. Počty úseček v obou směrech si nemusí odpovídat, lze zadat například pět úseček, které budou protínat čtyři úsečky. Krajní body úseček musí vždy ležet na hranicích ploch (strany koncentračního trojúhelníku nebo brázdy). Tyto body pak B-splajnová plocha interpoluje. Úsečky v jednom směru se nesmí protínat, mohou mít však společné krajní body. Hustota úseček se volí podle složitosti aproximované plochy.



Obr. 4.9 Schematický příklad vhodného popisu části plochy likvidu.

Plocha je popsána 5 úsečkami. Na každé úsečce je 5 bodů.

Po stisknutí tlačítka „Data“ se otevře okno na vytvoření datového souboru respektive na úpravu dat z již existujícího souboru (obr. 4.10). Toto okno lze rozdělit na tři oblasti.

Vstupni_data

Vstupní soubor:

Info: Soubor má celkem ploch: 3, Plocha má celkem úseček: 5

Zadáni bodů: plocha č. úsečka č.

čisté složky:

	A	B	C	T [°C]
6.	85	15	0	940
7.	74	13	13	880
8.	63	11	26	820
9.	50	9	41	740
10.	39	8	53	660

Grafické zobrazení dat:

Obr. 4.10 Okno Data

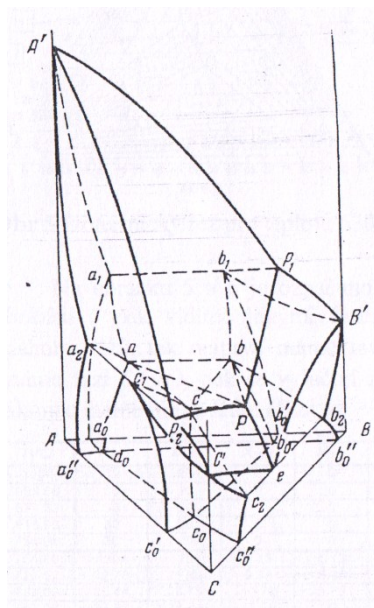
1. *Vstupní soubor a čisté složky* – Zde se zapisuje název souboru a názvy tří složek ternárního systému. Při zadávání nového systému je také v této oblasti zapisovací pole, popisující počet bodů na úsečkách na jednotlivých plochách.
2. *Zadání bodů* – Po nastavení aktuální plochy a aktuální úsečky lze zadat potřebné body. Body jsou přesně dány koncentrací dvou prvků (třetí lze nechat dopočítat) a teplotou. Po zadání bodů na celé úsečce se úsečka uloží pomocí tlačítka „*Ulož do souboru*“.
3. *Grafické zobrazení dat* – Pro kontrolu a orientaci slouží okno grafického zobrazení zadáných bodů. Tyto se zobrazí po stisknutí tlačítka „*Načti ze souboru*“. Pokud je třeba detailnějšího pohledu, je možno tlačítkem „*Graf do okna*“ zobrazit graf v samostatném okně a tam libovolně přiblížit potřebnou oblast.

5 Porovnání modelování ternárních systémů

V této kapitole je předvedeno použití programu na konkrétní systémy. Výstupní obrázky jsou vždy srovnávány s výstupními obrázky, vytvořenými starým programem [2].

5.1 Peritektický ternární systém II b

Jedná se o systém se dvěma peritektickými binárními reakcemi a jednou eutektickou binární reakcí (obr. 5.1) [1].



Obr. 5.1 Typ II b [10]

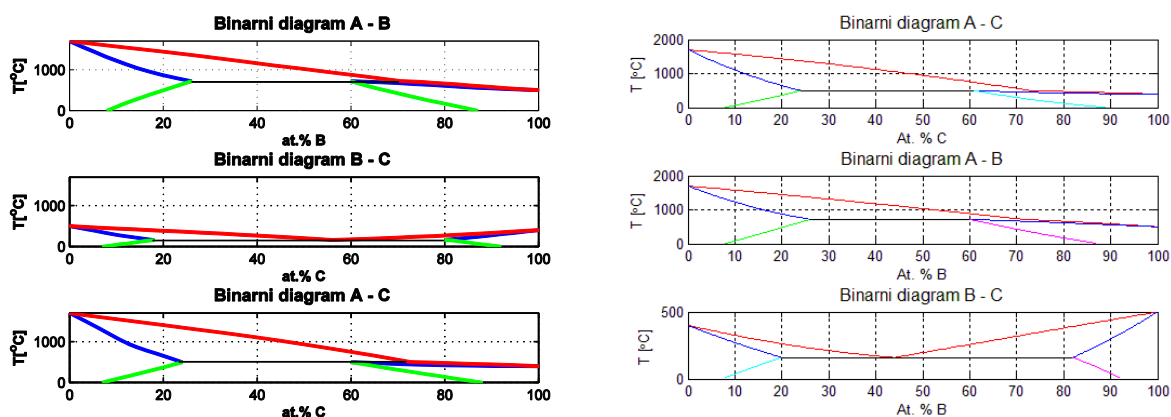
Základní údaje tohoto systému udává tabulka 5.1.

Tab. 5.1 Základní údaje systému A-B-C (typ II b)

Typ	II b	Poloha	
Teplota tání prvku A	1700°C	0% B	0% C
Teplota tání prvku B	500°C	100% B	0% C
Teplota tání prvku C	400°C	0% B	100% C
Binární peritektikum A-B	720°C	71% B	0% C
Binární peritektikum A-C	500°C	0% B	73% C
Binární eutektikum B-C	160°C	44% B	56% C
Ternární peritektikum	450°C	38% B	45% C

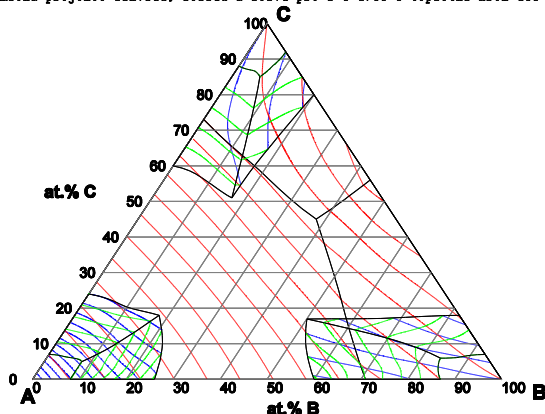
5.1.1 Binární diagramy

Následující obrázky ukazují výstupy z programu. Jsou prezentovány binární diagramy (obr. 5.2) a izotermy (obr. 5.3). Vždy je k dispozici srovnání s výstupy staršího programu [2].

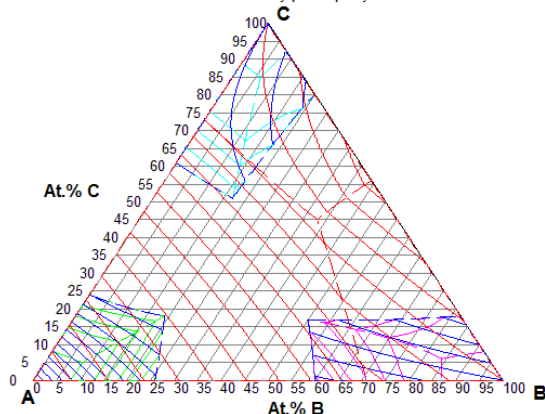


Obr. 5.2 a) Binární diagramy v novém programu, b) Binární diagramy [2]

Izotermická projekce likvidu, solidu a solvu pro $T=0-1700^{\circ}\text{C}$ teplotní krok 100°C



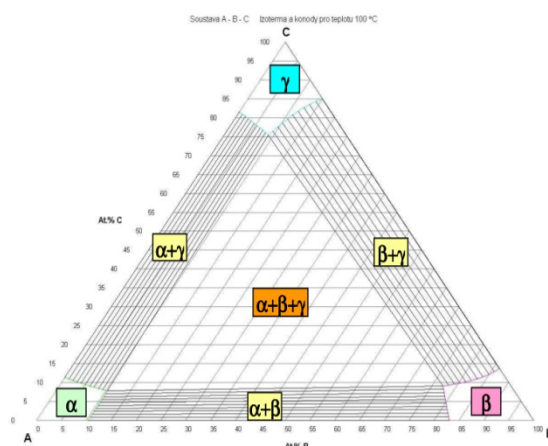
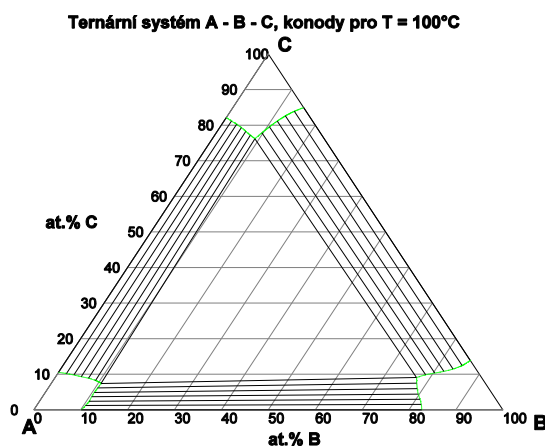
Soustava A - B - C Izotermy pro teploty 200 - 1700



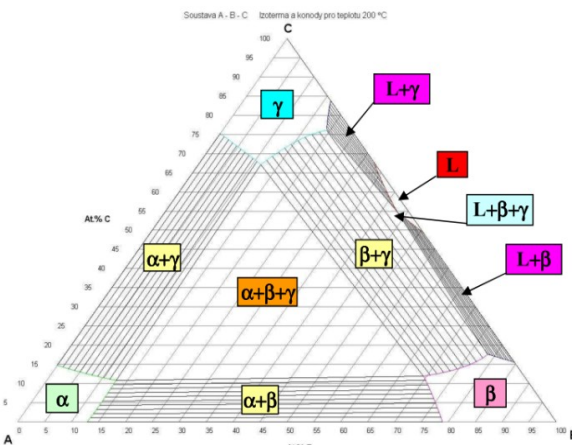
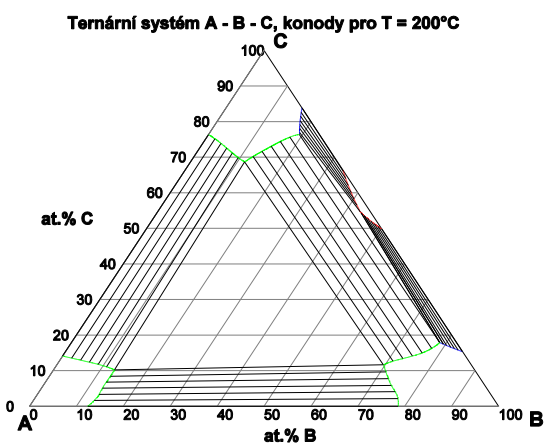
Obr. 5.3 a) Izotermy v novém programu, b) Izotermy [2]

5.1.2 Izotermické řezy a konody

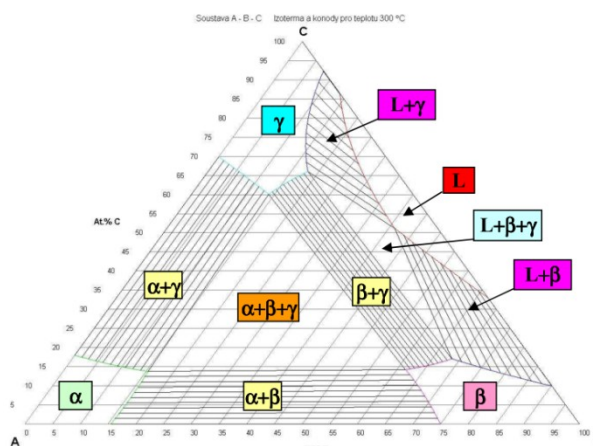
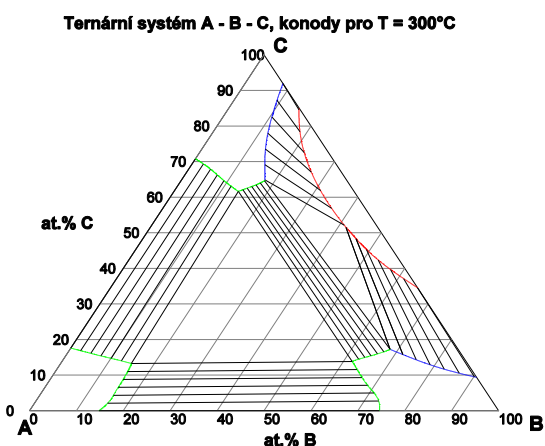
Následující obrázky ukazují výstupy z programu. Jsou prezentovány izotermické řezy a konody pro různé teploty (obr. 5.4 až obr. 5.10). Vždy je k dispozici srovnání s výstupy staršího programu [2].



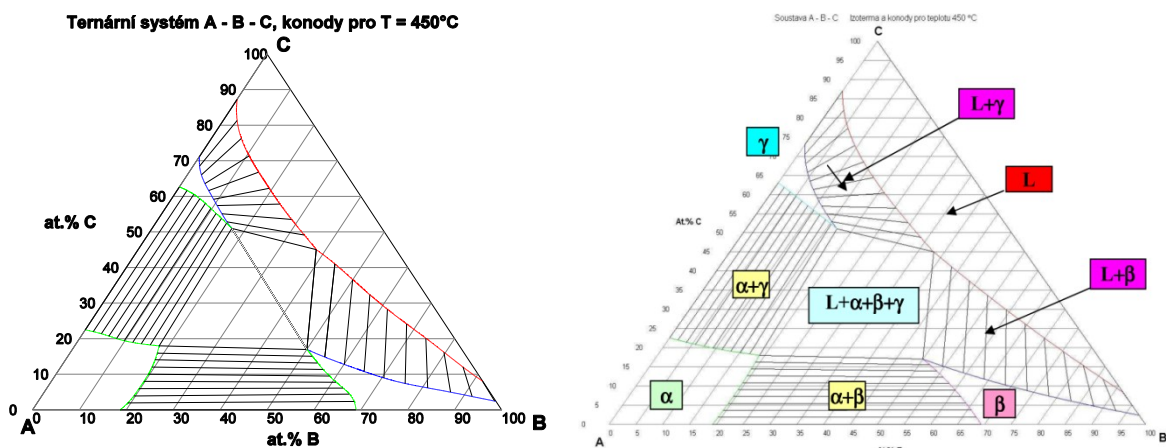
Obr. 5.4 a) Řez pro teplotu 100°C , b) Odpovídající obrázek z [2]



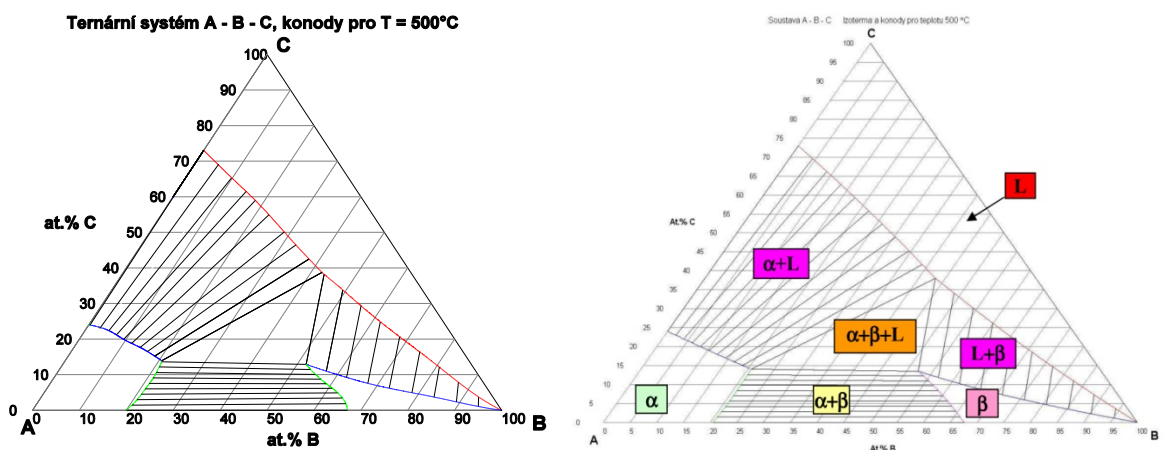
Obr. 5.5 a) Řez pro teplotu 200°C , b) Odpovídající obrázek z [2]



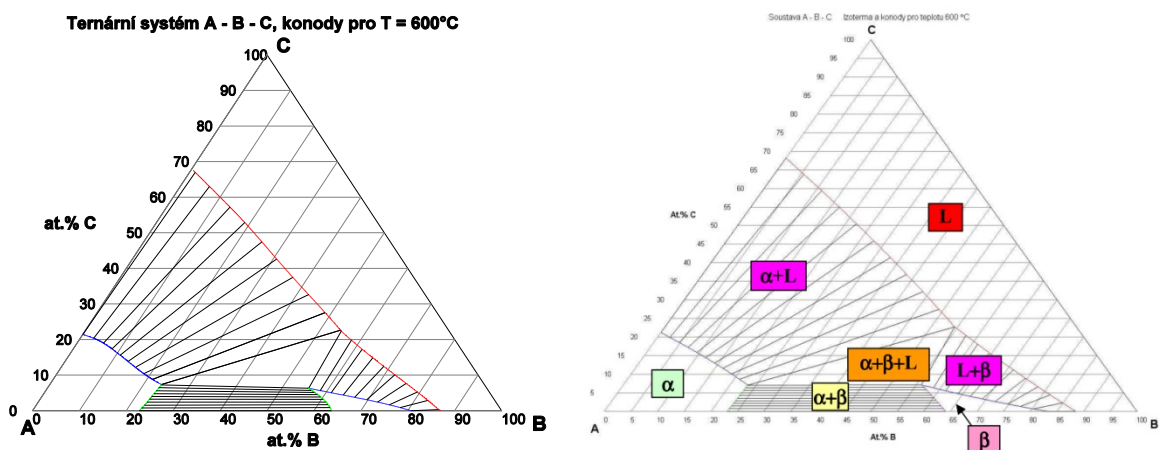
Obr. 5.6 a) Řez pro teplotu 300°C , b) Odpovídající obrázek z [2]



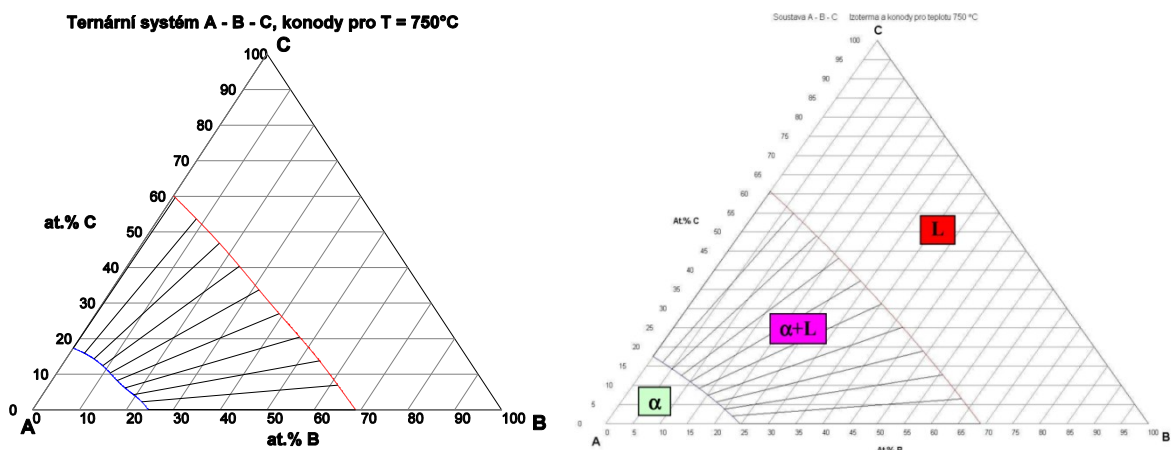
Obr. 5.7 a) Řez pro teplotu 450°C , b) Odpovídající obrázek z [2]



Obr. 5.8 a) Řez pro teplotu 500°C , b) Odpovídající obrázek z [2]



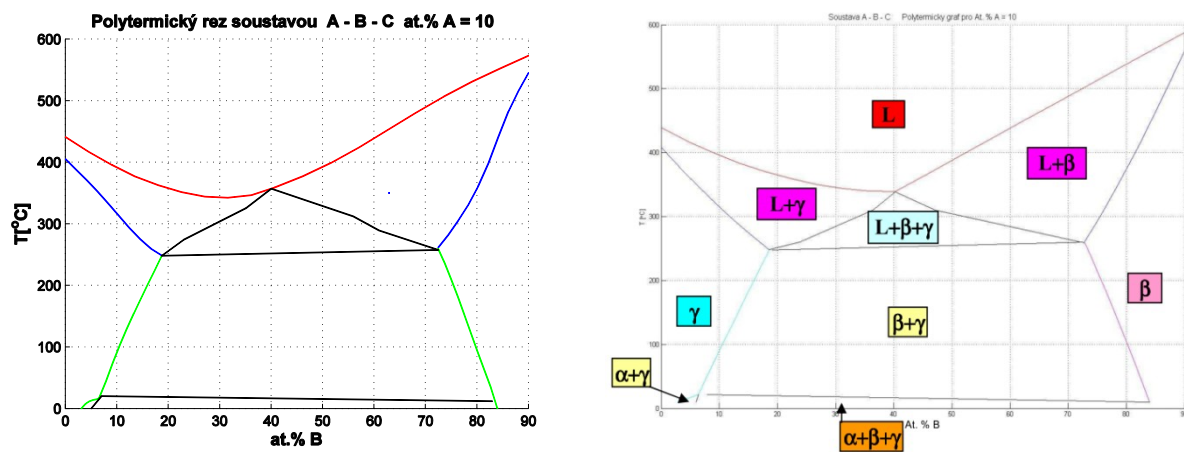
Obr. 5.9 a) Řez pro teplotu 600°C , b) Odpovídající obrázek z [2]



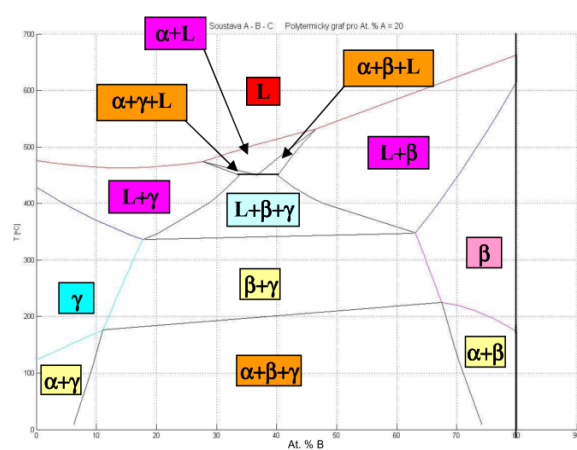
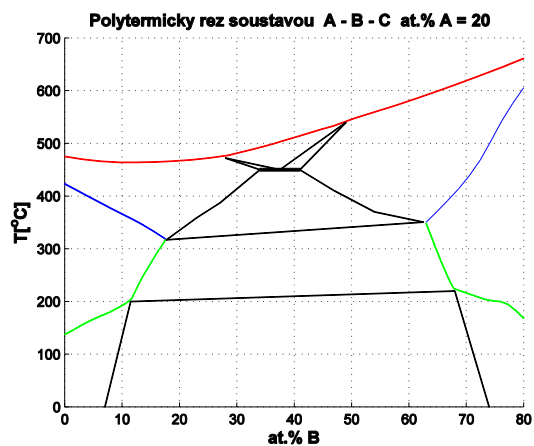
Obr. 5.10 a) Řez pro teplotu 750°C, b) Odpovídající obrázek z [2]

5.1.3 Polytermické řezy

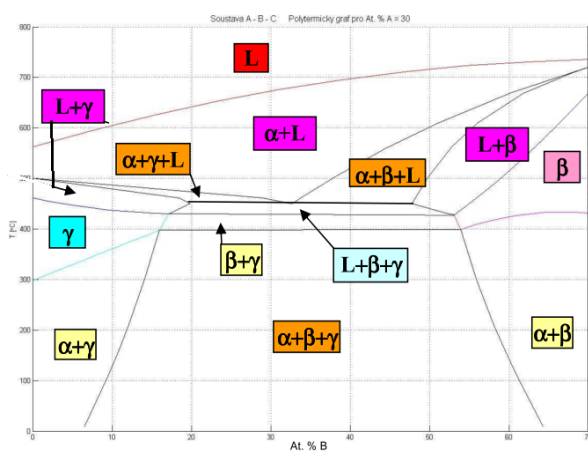
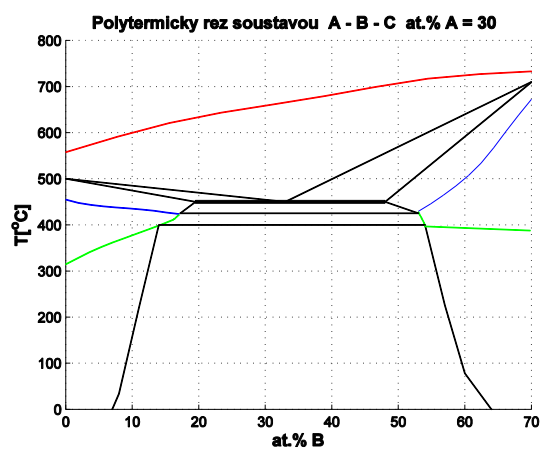
Následující obrázky ukazují výstupy z programu. Jsou prezentovány polytermické řezy pro různé koncentrace složky A (obr. 5.11 až obr. 5.17). Vždy je k dispozici srovnání s výstupy staršího programu [2].



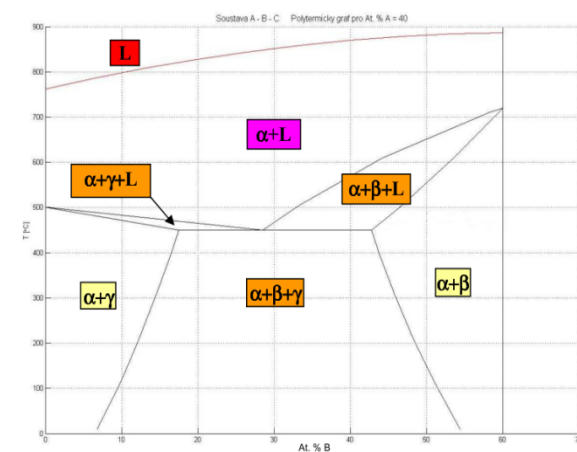
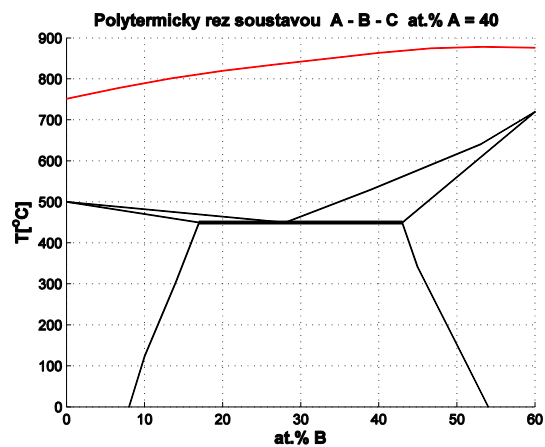
Obr. 5.11 a) Řez pro koncentraci 10% A, b) Odpovídající obrázek z [2]



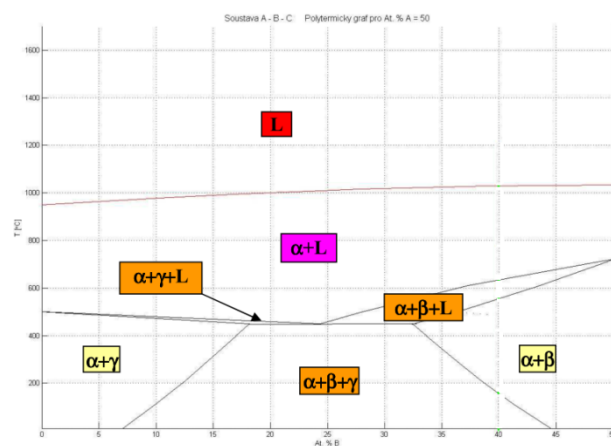
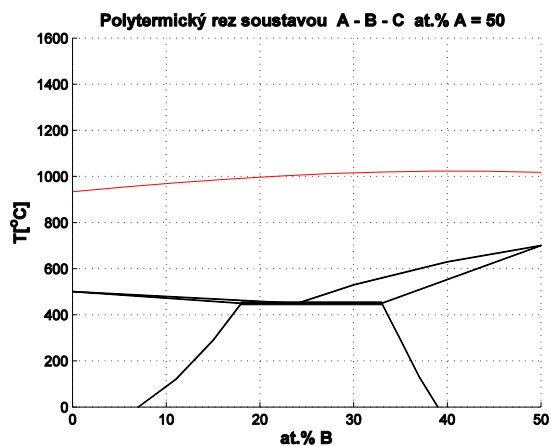
Obr. 5.12 a) Řez pro koncentraci 20% A, b) Odpovídající obrázek z [2]



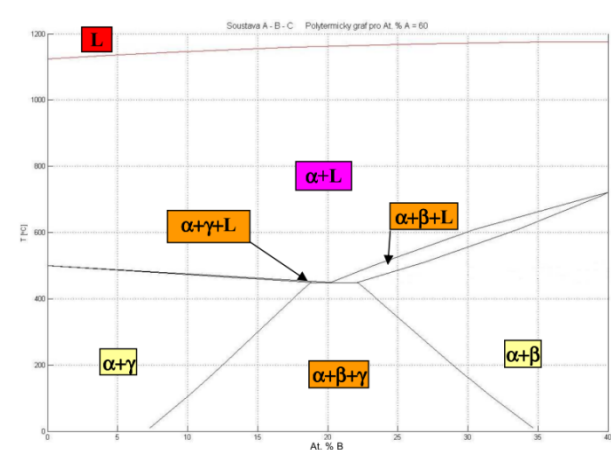
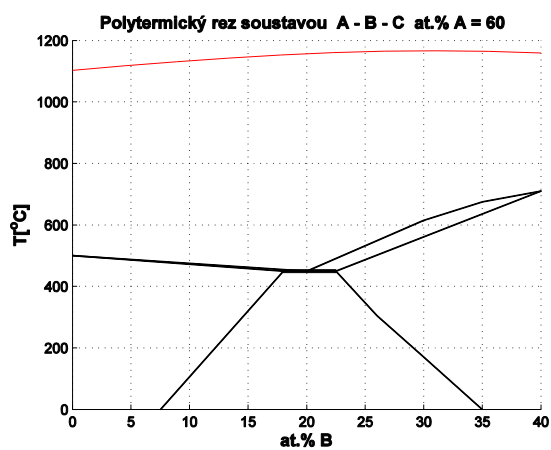
Obr. 5.13 a) Řez pro koncentraci 30% A, b) Odpovídající obrázek z [2]



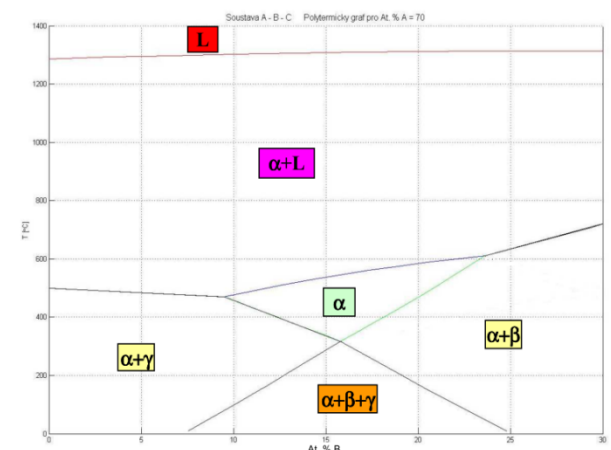
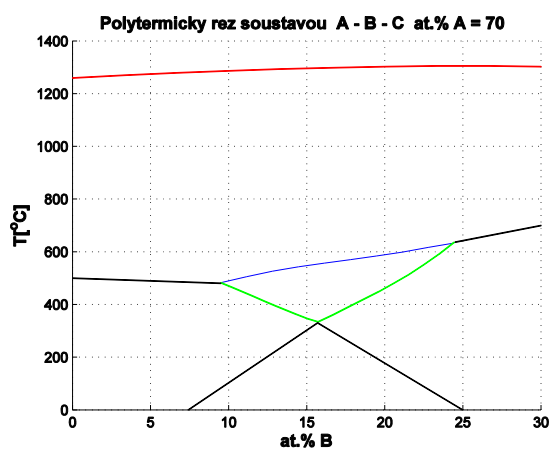
Obr. 5.14 a) Řez pro koncentraci 40% A, b) Odpovídající obrázek z [2]



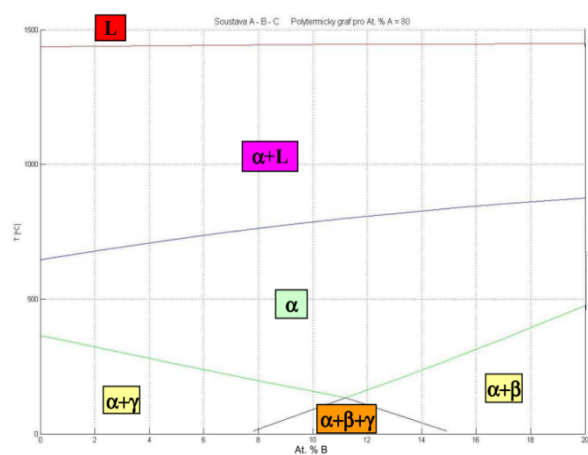
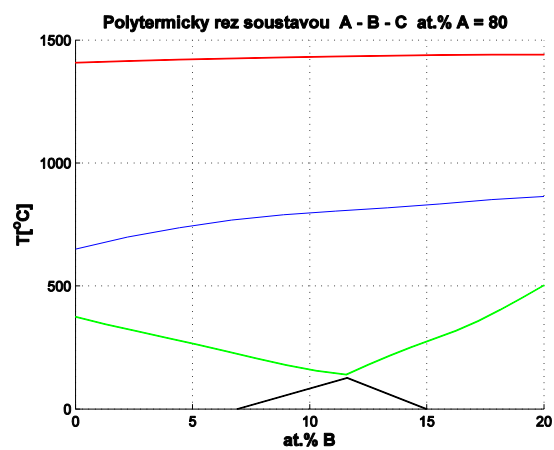
Obr. 5.15 a) Řez pro koncentraci 50% A, b) Odpovídající obrázek z [2]



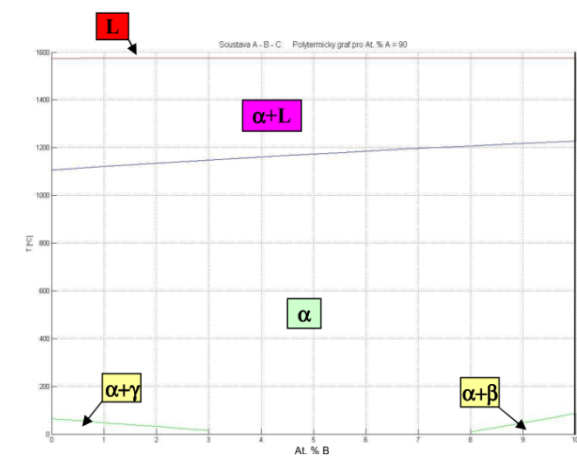
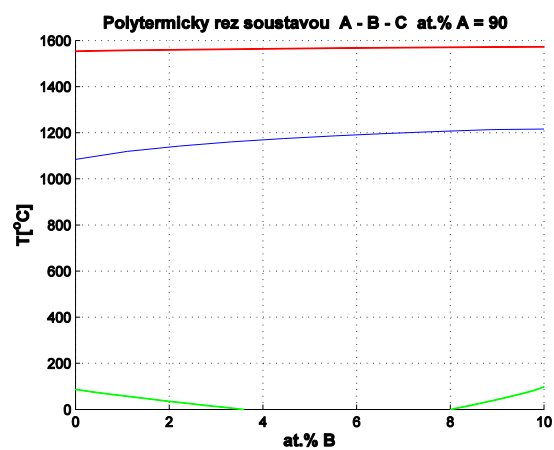
Obr. 5.16 a) Řez pro koncentraci 60% A, b) Odpovídající obrázek z [2]



Obr. 5.17 a) Řez pro koncentraci 70% A, b) Odpovídající obrázek z [2]



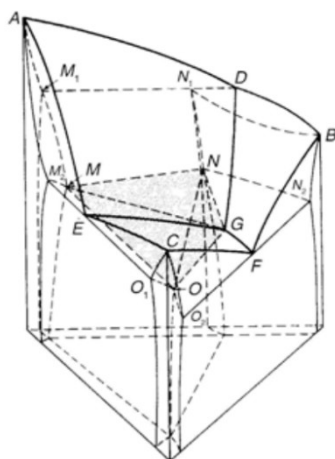
Obr. 5.18 a) Řez pro koncentraci 80% A, b) Odpovídající obrázek z [2]



Obr. 5.19 a) Řez pro koncentraci 90% A, b) Odpovídající obrázek z [2]

5.2 Peritektický ternární systém II a

Jedná se o systém se dvěma eutektickými binárními reakcemi a jednou peritektickou binární reakcí (obr. 5.20) [1].



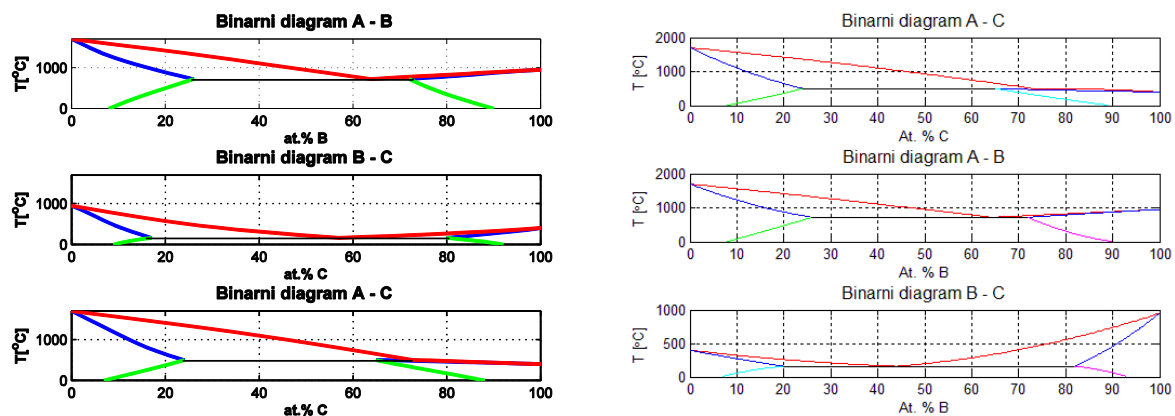
Obr. 5.20 Typ II a [10]

Základní údaje tohoto systému udává tabulka 5.2.

Tab. 5.2 Základní údaje systému A-B-C (typ II a)

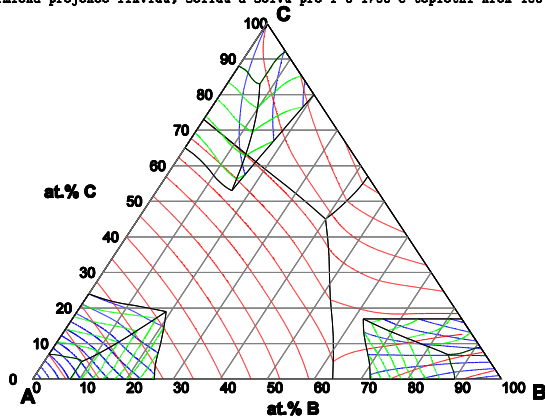
Typ	II a	Poloha	
Teplota tání prvku A	1700°C	0% B	0% C
Teplota tání prvku B	950°C	100% B	0% C
Teplota tání prvku C	400°C	0% B	100% C
Binární eutektikum A-B	720°C	64% B	0% C
Binární peritektikum A-C	500°C	0% B	73% C
Binární eutektikum B-C	160°C	43% B	57% C
Ternární peritektikum	450°C	40% B	45% C

Pro tento systém lze vygenerovat izotermické i polytermické řezy analogicky se systémem II b prezentovaným výše. Proto budou pro systém II a uvedeny jen binární diagramy (obr. 5.21) a izotermie (obr. 5.22). Vždy je k dispozici srovnání s výstupy staršího programu [2].

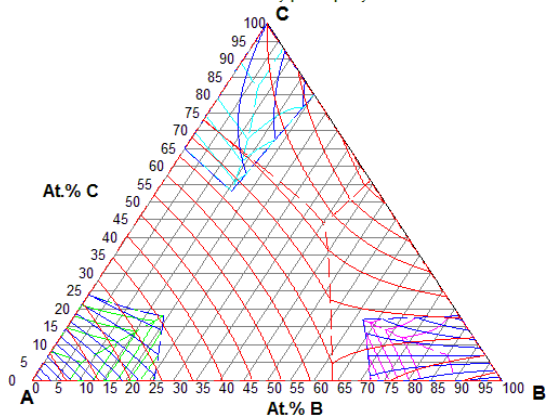


Obr. 5.21 a) Binární diagramy v novém programu, b) Binární diagramy [2]

Izotermická projekce likvidu, solidu a solvu pro $T=0-1700^{\circ}\text{C}$ teplotní krok 100°C



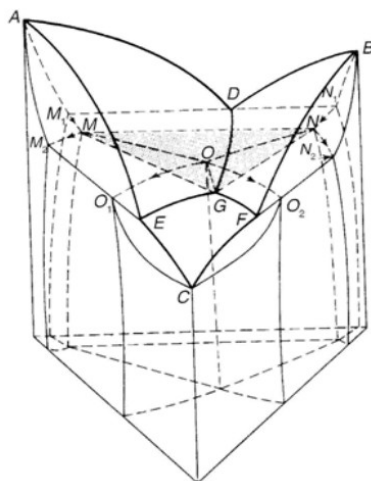
Soustava A - B - C Izotermie pro teploty 200 - 1700



Obr. 5.22 a) Izotermie v novém programu, b) Izotermie [2]

5.3 Peritektický ternární systém III

Jedná se o systém se dvěma peritektickými binárními reakcemi a jednou eutektickou binární reakcí (obr. 5.23) [1].



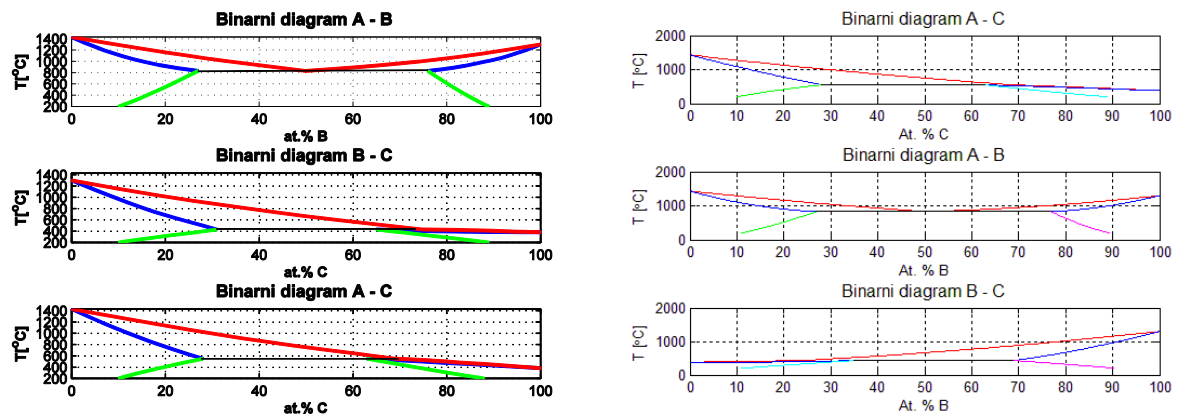
Obr. 5.23 Typ III [10]

Základní údaje tohoto systému udává tabulka 5.3.

Tab. 5.3 Základní údaje systému A-B-C (typ III)

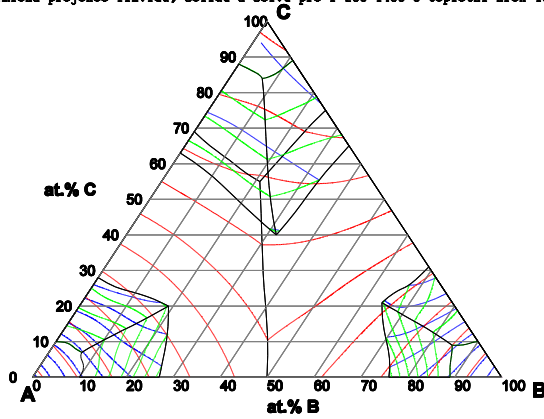
Typ	III	Poloha	
Teplota tání prvku A	1430°C	0% B	0% C
Teplota tání prvku B	1300°C	100% B	0% C
Teplota tání prvku C	380°C	0% B	100% C
Binární eutektikum A-B	830°C	50% B	0% C
Binární peritektikum A-C	550°C	0% B	69% C
Binární peritektikum B-C	430°C	25% B	75% C
Ternární peritektikum	610°C	21% B	55% C

Pro tento systém lze vygenerovat izotermické i polytermické řezy analogicky se systémem II b prezentovaným výše. Proto budou pro systém III uvedeny jen binární diagramy (obr. 5.24) a izotermy (obr. 5.25). Vždy je k dispozici srovnání s výstupy staršího programu [2].

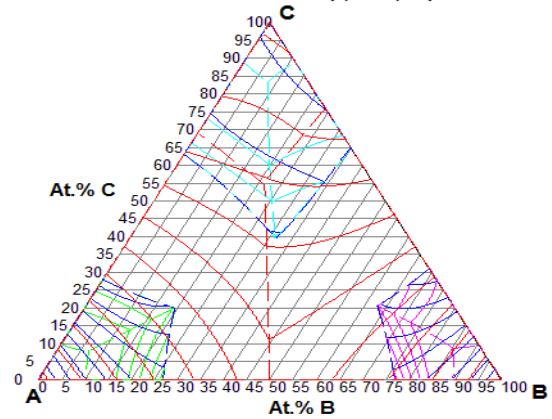


Obr. 5.24 a) Binární diagramy v novém programu, b) Binární diagramy [2]

Izotermická projekce likvidu, solidu a solvu pro $T=200-1400^{\circ}\text{C}$ teplotní krok 100



Soustava A - B - C Izotermie pro teploty 400 - 1400



Obr. 5.25 a) Izotermie v novém programu, b) Izotermie [2]

6 Diskuse a závěr

Cílem této bakalářské práce bylo porovnání dvou numerických metod v modelování ternárních systémů kovových slitin. Pozornost práce byla soustředěna na program „*Software pro modelování ternárních systémů slitin*“ a na výpočetní aparát, který tento program využívá. K samotnému porovnání došlo jak v rovině uživatelského přístupu k problematice tak v rovině grafických výstupních dat.

Samotný výpočetní aparát – B-splajnové plochy – byl podrobně vysvětlen, naprogramován a předveden na konkrétních příkladech ve třetí kapitole této práce. Ve čtvrté kapitole bylo popsáno grafické uživatelské rozhraní programu a správný způsob jeho použití. Jako konkrétní příklad posloužil modelový eutektický ternární systém A-B-C. Celá pátá kapitola se zabývala titulním tématem bakalářské práce, a sice porovnáním nového programu, založeného na aproximaci ploch likvidu a solidu pomocí B-splajnových ploch, se starším programem, založeným na aproximaci ploch likvidu a solidu pomocí kvadratických ploch. Výsledky byly demonstrovány na třech modelových peritektických systémech A-B-C (typy II a, II b, III). Starší program a jeho nevýhody stručně shrnula druhá kapitola.

Bakalářská práce a její přínos je veskrze kladný, neboť byl při jejím vypracovávání výpočetní program značně vylepšen a odladěn. Plně se prověřila funkčnost nového programu a podchytily se problematické stavy, na které by mohli budoucí uživatelé narazit. Jedním z největších úskalí programu zůstává, stejně jako ve starším programu, potřeba dostatku vstupních dat. Vstupní data neboli body na plochách s přesnou polohou a teplotou jsou základním kamenem pro přesné modelování ploch likvidu a solidu a jejich zdrojem je literatura nebo experimentálně zjištěná data. Za nevýhodu se dá také považovat časová náročnost programu, kdy výpočty polytermických nebo izotermických řezů trvají řádově minuty. Tato nevýhoda je však pouze relativní, neboť má velmi úzkou spojitost s výkonností počítače. Pokud se předpokládá trend zlepšování a vyvíjení výpočetní techniky, může se předpokládat i snižování potřebného výpočetního času tohoto programu.

Problematika ternárních slitin je velmi aktuální a ne zcela probádanou oblastí metalurgie. Nový výpočetní program jistě přispěje k jejímu pochopení a vyřešení některých otázek. Proto je nasnadě jeho budoucí aktivní používání a případně ještě další vylepšování.

Cíl práce byl naplněn a zvládnut.

Tato práce vznikla v rámci řešení projektu: MŠM 6198910013 „*Procesy přípravy a vlastnosti vysoce čistých a strukturně definovaných speciálních materiálů*“.

Seznam použité literatury

- [1] DRÁPALA, Jaromír. *Ternární systémy*. E-learning. VŠB – TU Ostrava, 2010. 43 s.
- [2] PĚRŠALA, Pavel. *Modelování ternárních systémů peritektického a eutektického typu*. Ostrava, 2009. 59 s. Bakalářská práce na Fakultě metalurgie a materiálového inženýrství VŠB – TUO na katedře neželezných kovů, rafinace a recyklace. Vedoucí bakalářské práce prof. Ing. Jaromír Drápala, CSc.
- [3] WEST, D. R. F., SAUNDERS, N. *Ternary Phase Diagrams in Material Science*. 3rd Edition. London: Maney for the Institute of Materials, 2002. 240 p. ISBN 978-19-02-65352-5.
- [4] KOBZA, Jiří. *Splajny*. 1.vyd. Olomouc: Vydavatelství Univerzity Palackého, 1993. 224 s. ISBN 978-80-70-67265-5.
- [5] CHAIKIN, George. *An algorithm for high speed curve generation*. New York University, 1974. 349 p.
- [6] LINKEOVÁ, Ivana. *NURBS křivky*. 1.vyd. Praha: Nakladatelství ČVUT, 2007. 208 s. ISBN 978-80-01-03893-2.
- [7] MORÁVKOVÁ, Z., VRBICKÝ, J., DRÁPALA, J., MADAJ, M. Využití B-splajnových ploch v ternárních systémech slitin. *Sborník z 19. semináře Moderní metody v inženýrství*, 31. 5. – 2. 6. 2010, Dolní Lomná. Ostrava: VŠB – TUO, 2010. 93-97 s. ISBN 978-80-248-2342-3.
- [8] PIEGL, L., TILLER, W. *The NURBS Book*. 2nd Edition. Berlin: Springer, 1997. 646 p. ISBN 3-540-61545-8.
- [9] MORÁVKOVÁ, Z., VRBICKÝ, J., DRÁPALA, J., MADAJ, M. Výpočet polytermických řezů v ternárních systémech slitin. *Sborník z 20. semináře Moderní metody v inženýrství*, 30. 5. – 1. 6. 2011, Dolní Lomná. Ostrava: VŠB – TUO, 2011. 66-70 s. ISBN 978-80-248-2517-5.
- [10] PETROV, D. A. *Dvojnyje i trojnyje sistemy*. Moskva: Metallurgija, 1986. 334 s.